

DISSERTATION

**Untersuchung der strukturellen und
magnetischen Eigenschaften ultradünner
3d-Metall-Filme auf Fe(100) mit
Ionenstrahlen**

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium

(Dr. rer. nat.)

im Fach Physik

eingereicht an der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
der Humboldt-Universität zu Berlin
von

Dipl.-Phys. Thomas Igel
geboren am 27.01.1969 in Dahme

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin
Prof. Dr. Jürgen Mlynek

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Prof. Dr. Bernhard Ronacher

Gutachter:

1. Prof. Dr. Helmut Winter
2. Prof. Dr. Ricardo Manzke
3. Prof. Dr. Klaus Baberschke

eingereicht am: 02.07.2001
Tag der Promotion: 10.12.2001

Überblick

Schlagworte: Streifende Ionenstreuung, Filmwachstum, Magnetismus, Fe(100), Cr/Fe(100), Mn/Fe(100), V/Fe(100)

Ultradünne Filme der 3d-Metalle auf einem magnetischen Substrat können durch die magnetische Kopplung ebenfalls eine Magnetisierung erfahren. Im allgemeinen ist die Art und Stärke der induzierten magnetischen Momente von der Dicke und der Struktur dieser Filme abhängig.

In dieser Arbeit wurden speziell die Wachstumseigenschaften von Fe, Cr, Mn und V auf einem Fe(100)-Substrat bezüglich ihrer Morphologie und der Grenzflächeninterdiffusion sowie die magnetische Kopplung der Filme zum Substrat untersucht.

Bei diesen Studien kam primär die streifende Oberflächenstreuung schneller Ionen (H^+ , He^+ , Ar^+) mit Primärenergien von bis zu 25keV unter typischen Einfallswinkeln von $1..2^\circ$ zur Oberfläche zum Einsatz. Bei einer solchen Streuung können die Projektile nicht in die Oberfläche eindringen, sondern werden von dieser reflektiert. Insbesondere die Aufnahme der spekularen Streuintensität und die Halbwertsbreite der resultierenden Streuverteilung erlaubten die Beobachtung des Wachstumsprozesses in *Echtzeit* sowie die quantitative Bestimmung von Stufendichten, kritischen Keimgrößen, den Füllungsgrad atomarer Filmlagen, Aktivierungsenergien der lateralen Diffusion, die Änderung der Austrittsarbeit, sowie die Größe der thermischen Auslenkungen der Oberflächenatome.

Die Anregung von Auger-Elektronen an der Oberfläche bei der streifenden Streuung von Protonen erlaubte in Verbindung mit der konventionellen Auger-Spektroskopie nach Anregung durch steil einfallende Elektronen die Bestimmung der Konzentrationsprofile an der Grenzfläche des Films zum Substrat bei unterschiedlich starker Grenzflächeninterdiffusion.

Die Charakterisierung der magnetischen Oberflächenmomente des Fe(100) und der darauf gewachsenen 3d-Metallfilme erfolgte indirekt aus der Polarisation des Fluoreszenzlichts aus dem Zerfall des $HeI3^3P$ -Zustandes nach der Streuung, der durch den Einfang der polarisierten Elektronen von der Oberfläche entsprechend der dort vorhandenen Zustandsdichte besetzt wird.

Grundlegende Zusammenhänge zwischen der Spin-Polarisation des $HeI3^3P$ -Zustandes und der Magnetisierung der streuenden Oberfläche wurden am Fe(100) studiert. Mittels einfacher Modelle konnte in diesen Studien die extreme Oberflächenempfindlichkeit der angewendeten Meßmethode wie auch die qualitative Abhängigkeit der Spin-Polarisation von der elektronischen Zustandsdichte der Festkörper-Oberfläche nachgewiesen werden.

Für die Interpretation der Polarisationsdaten beim heteroepitaktischen Filmwachstum war es notwendig, das Wachstum möglichst realitätsnah in einem Modell abzubilden. Dazu wurde ein bereits bestehendes Modell zur Beschreibung des homoepitaktischen Filmwachstums auf niedrigindizierten Oberflächen weiterentwickelt, so daß auch die zeitliche Entwicklung der Interdiffusion bei heteroepitaktischem Wachstum beschrieben werden kann. Die Eichung des Modells erfolgte mit den Ergebnissen aus der Untersuchung des Wachstums mit der streifenden Ionenstreuung und der Auger-Spektroskopie.

Damit wurde es erstmals möglich, die Magnetisierung der heteroepitaktisch gewachsenen 3d-Metallfilme bei nicht idealem Filmwachstum und deutlicher Grenzflächeninterdiffusion anhand experimenteller Ergebnisse von ein und derselben Probe zu beschreiben sowie den Zusammenhang zwischen Struktur, Interdiffusion und Magnetisierung nachzuweisen.

Abstract

Keywords: surface scattering of ions, film growth, magnetism, Fe(100), Cr/Fe(100), Mn/Fe(100), V/Fe(100)

Ultrathin films of 3d-metals on a magnetic substrate can experience a magnetization due to magnetic coupling. Commonly the induced magnetic moments depend on the thickness and the structure of these films.

This work is focussed on the growth properties of Fe, Cr, Mn, and V on the Fe(100) surface with respect to the morphology and the interdiffusion at the interface as well as the magnetic coupling of the film to the substrate. In the experiments mainly the grazing surface scattering of fast ions (H^+ , He^+ , Ar^+) was applied with primary energies up to 25keV and typical incidence angles of $1..2^\circ$ to the surface. Using this grazing scattering geometry the projectiles cannot penetrate into but are reflected from the surface. Especially the monitoring of the specular intensity and halfwidth of the resulting scattering distribution enabled the observation of growth processes in *real time* as well as the quantitative determination of step density, critical growth nuclei, filling of atomic layers, activation energy of lateral diffusion on the surface, change of workfunction, and the size of thermal vibrational amplitudes of the surface atoms.

The excitation of Auger electrons at the surface on one hand side by grazing scattering of protons and on the other hand side by electrons at large incidence angles was used to determine the concentration profile at the interface between film and substrate at different degrees of interdiffusion.

The magnetic moments of the Fe(100) surface and the 3d-metal films grown on it was indirectly characterized by the polarization of fluorescence light from the deexcitation of $HeI3^3P$ -state after the scattering. This atomic state was filled by spin polarized electrons from the surface corresponding to the surface state densities.

Basic relations between the spin polarization of the $HeI3^3P$ -state and the magnetization of the scattering surface was tested at the Fe(100) surface. Applying simple models an extreme surface sensitivity of the method used here as well as the qualitative dependence of the spin polarization from electron density of states of the surface layer was observed.

For the interpretation of the polarization data recorded during heteroepitactical film growth it was necessary to model the growth realistically. Therefore an existing model for homoepitactical film growth on low index surfaces was further developed in order to describe the history of interdiffusion during heteroepitactical film growth. The parameters in the model were adjusted by means of the results from the growth studies with grazing surface scattering and Auger spectroscopy.

So for the first time the description of the magnetization of heteroepitactically grown 3d-metal films with nonideal layer growth and interdiffusion both related to experimental results at the same specimen was made possible. Furthermore the interaction between film structure, interdiffusion and magnetization was shown.

INHALT

1	Einleitung	6
2	Experimentelle Methoden	8
2.1	Streifende Ionenstreuung	8
2.1.1	Streugeometrie und Streuverteilung	9
2.1.2	Einfluss der Oberfläche	10
2.2	Einfang polarisierter Elektronen	12
2.2.1	Nachweis der Polarisierung atomarer Terme	13
2.3	Auger-Spektroskopie	14
3	Experiment	16
3.1	Kleinbeschleuniger	16
3.2	Streukammer	16
3.3	Targethalterung	19
3.3.1	Probenmagnetisierung	20
3.3.2	Streiffelder	21
3.3.3	Bestimmung der Target-Temperatur	23
3.4	Fluoreszenzlicht-Analyse	24
3.4.1	Polarisationsautomat	24
3.4.2	Zweikanaldetektor	26
3.5	Targetpräparation	29
4	Simulationen	31
4.1	Simulation des Streuprozesses	31
4.2	Wachstum und Interdiffusion	32
5	Untersuchungen an Fe(100)	37
5.1	Ionenstreuung an Fe(100)	37
5.1.1	Fokussierungseffekte am <001>-Kanal	37
5.1.2	Terrassen	41
5.1.3	Thermische Schwingungen	43
5.2	Einfang polarisierter Elektronen von der Fe(100)-Oberfläche	45
6	Wachstum von Übergangsmetall-Filmen auf Fe(100)	58
6.1	Fe(100)-Homoepitaxie	58
6.2	Cr-Filme auf Fe(100)	66

6.2.1	Morphologische Struktur der Cr-Filme	66
6.2.2	Chemische Struktur dünner Cr-Filme auf Fe(100).....	70
6.3	Mn-Filme auf Fe(100)	74
6.3.1	Morphologische Struktur der Mn-Filme.....	75
6.3.2	Chemische Struktur dünner Mn-Filme auf Fe(100).....	81
6.4	V-Filme auf Fe(100).....	89
6.5	Austrittsarbeiten.....	93
7	Magnetische Eigenschaften der Filme	98
7.1	Fe/Fe(100).....	99
7.2	Das Modellsystem Fe/Cr/Fe(100).....	100
7.3	Cr/Fe(100)	103
7.3.1	Berechnung der magnetischen Momente	107
7.3.2	Ergebnisse anderer Messmethoden	111
7.4	Mn/Fe(100)	113
7.5	V/Fe(100).....	118
8	Zusammenfassung	122

1 EINLEITUNG

Die erst in den letzten Jahrzehnten erwachsenen Möglichkeiten der Erzeugung und Kontrolle sehr tiefer Drücke in entsprechenden Vakuumanlagen mit vertretbarem technischen Aufwand sowie die Entwicklung neuer Techniken zur Präparation und Manipulation sauberer Einkristall-Oberflächen förderte die rasante Entwicklung der Oberflächenphysik und ihrer Teilgebiete mit zunehmender Intensität. So sind im Laufe weniger Jahre eine Reihe neuer Methoden entwickelt worden, welche die Untersuchung verschiedenster Eigenschaften an Festkörper-Oberflächen gestatten. Dennoch ist es aufgrund der komplexen Zusammenhänge unterschiedlichster physikalischer Eigenschaften - wie der geometrischen und elektronischen Struktur, mechanischer, optischer, thermischer oder elektrischer Eigenschaften, der Wechselwirkung mit externen elektromagnetischen Feldern, geladenen und ungeladenen Teilchen und vieles andere mehr - nach wie vor schwierig, spezifische Merkmale separat zu charakterisieren. Dabei spielt auch die Reduzierung der Dimension eine nicht zu unterschätzende Rolle.

Die Vielfalt der eingesetzten Untersuchungsmethoden eröffnet häufig Möglichkeiten zur Erlangung übereinstimmender Erkenntnisse auf verschiedenen Wegen und stärkt damit das Vertrauen in die Ergebnisse. Auf der anderen Seite gelangt man bei nur geringen Unterschieden in den untersuchten Systemen und aufgrund verschiedener Wechselwirkungen entsprechend der angewendeten Meßmethoden sehr schnell zu völlig entgegengesetzten Aussagen, die die Diskussion anregen und wiederum nach immer neuen und anderen Wegen experimenteller Untersuchungen und theoretischer Beschreibungen verlangen.

Eine dieser relativ neuen Methoden zur Untersuchung von Festkörper-Oberflächen ist die Ionen-Streuung unter sehr flachen Einfallswinkeln. Diese zeichnet sich durch eine hohe Empfindlichkeit auf die obersten Atomlagen und eine breite Anwendung mit Sensitivität auf verschiedene Phänomene wie der geometrischen und elektronischen Struktur an der Oberfläche, dem Ladungsaustausch, magnetischen Eigenschaften oder auch Wachstumsphänomenen aus [z.B. RAU82, SV83, WIN88, FNK93, WIL95, AUT96, BTG99, PIW00].

In der vorliegenden Arbeit werden die Ergebnisse präsentiert, die im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 290 "Metallische dünne Filme: Struktur, Magnetismus und elektronische Eigenschaften" am Lehrstuhl "Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten" unter Leitung von Prof. Dr. H. Winter am Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin bei der Untersuchung der Fe(100)-Oberfläche und darauf epitaktisch gewachsenen Übergangsmetall-Filmen hinsichtlich ihrer strukturellen und magnetischen Eigenschaften mittels der streifenden Ionenstreuung gewonnen wurden. Der Schwerpunkt liegt dabei einerseits auf der Darstellung des Potentials der streifenden Ionenstreuung zur Untersuchung des Wachstums dünner Metall-Filme und andererseits in dem Vergleich der magnetischen Kopplungseigenschaften von Fe-, Cr-, Mn- und V-Filmen auf einer Fe(100)-Oberfläche innerhalb der ersten Monolagen.

Insbesondere bildet die Arbeit damit eine Fortsetzung der Untersuchungen von J. Leuker [LEU94] im Rahmen seiner Promotion an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster, in der mit dem Einfang polarisierter Elektronen in angeregte atomare Zustände die Fe(110)- und die Ni(111)-Oberfläche als Prototypen ferromagnetischer Einkristall-Oberflächen studiert wurden. Die dort gewonnenen Erkenntnisse werden durch methodische Studien ergänzt und die entsprechenden Experimente auf die epitaktischen 3d-Metallfilme angewendet.

Ferner wird neben den rein morphologischen Größen beim Filmwachstum auch die chemische Zusammensetzung der obersten Lagen beim heteroepitaktischen Wachstum analysiert, um entsprechende Interdiffusionsvorgänge zu charakterisieren.

Damit können Erkenntnisse über Zusammenhänge von strukturellen und magnetischen Eigenschaften der untersuchten Filme gewonnen werden.

2 EXPERIMENTELLE METHODEN

2.1 STREIFENDE IONENSTREUUNG

Die streifende Streuung von Elektronen, Atomen, Ionen und Molekülen hat sich in den letzten Jahren zur Grundlage verschiedener Methoden der Untersuchung von Festkörper-Oberflächen und Wachstumsphänomenen ultradünner Filme entwickelt. Dabei stand vor allem auch der Zusammenhang von spezifischen Struktureigenschaften der Oberfläche und der räumlichen Verteilung der Projektile nach der Streuung (Streuverteilung) für die Beurteilung der Leistungsfähigkeit der speziellen Meßmethoden zur Diskussion. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird u.a. das Potential der streifenden Ionenstreuung zur Charakterisierung von Oberflächenstrukturen dargestellt.

Eine wesentliche Rolle bei der Bestimmung von morphologischen Größen dieser Oberflächen spielt – abhängig von der Art der Projektile – die Wahl der Streugeometrie und der Primärenergie, die zum Beispiel eine Variation der Informationstiefe und der Wechselwirkungslänge des Projektils mit der Oberfläche gestatten [LD89, PC89].

Die Experimente dieser Arbeit wurden überwiegend mit der Methode der streifenden Streuung schneller Ionen durchgeführt, deren Grundlagen in verschiedenen Artikeln ausführlich beschrieben wurden [z.B. WZ88, PFA98]. Die wichtigste Eigenschaft für die Empfindlichkeit auf die oberste atomare Lage ist die geringe Senkrechtenergie. Diese ist trotz hoher Primärenergien der Sonden von $E_0 \sim 5..25\text{keV}$ unter Einfallswinkeln von typischerweise $\Phi_{\text{in}} = 1.5^\circ$ zur Oberfläche entsprechend dem Zusammenhang $E_{\perp} = E_0 \sin^2 \Phi_{\text{in}}$ etwa drei Größenordnungen kleiner. Das repulsive Potential zwischen Oberfläche und Projektil, welches in diesem Fall vor der obersten Netzebene der Festkörper-Oberfläche mit Werten von einigen 10eV bereits die Senkrechtenergie der Projektile übersteigt, verhindert bei idealen Oberflächen das Eindringen der Projektile in den Festkörper und führt zur spekularen Streuung, die insbesondere für die Beobachtung von Wachstumsprozessen ausgenutzt wurde.

Ein entscheidender Vorteil dieser Meßmethode gegenüber Beugungsmethoden besteht darin, daß eine einfache Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Projektil und Oberflächen-Atomen im Rahmen der klassischen Mechanik die experimentellen Ergebnisse gut reproduziert. So können aus dem Vergleich von experimentellen Daten und Monte-Carlo-Simulationen der Trajektorien auf der Basis der "Binärstoß-Näherung" Rückschlüsse auf die morphologischen Eigenschaften der Oberfläche gezogen werden [PFA98].

In den folgenden Abschnitten wird dargelegt, wie die streifende Streuung schneller Ionen zur Charakterisierung von Einkristall-Oberflächen eingesetzt werden kann. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den Prozessen, die für die durchgeführten Experimente

relevant sind und den Konsequenzen, die sich aus den Unterschieden von realen und idealisierten Oberflächen ergeben.

2.1.1 STREUGEOMETRIE UND STREUVERTEILUNG

Die Streugeometrie ist ein wichtiger Parameter für das Ausmaß, in dem sich spezifische Eigenschaften einer Oberfläche in der Streuverteilung widerspiegeln. Dies wird besonders anschaulich, wenn man bei Einkristall-Oberflächen die Regime des achsialen bzw. planaren "Channeling" (das ist die Streuung parallel niedrig- bzw. hochindizierter Kristallrichtungen) oder die Streuung unter- bzw. oberhalb des kritischen Einfallswinkels (bei dem die Senkrechtenergie des Projektils gleich dem Oberflächenpotential an der obersten Netzebene ist) vergleicht [LIN65].

In Abb. 2-1 ist das Prinzip der Oberflächenstreuung skizziert. Der einfallende Ionenstrahl mit dem polaren Einfallswinkel Φ_{in} spannt mit der Oberflächen-Normalen die Streuebene auf, die azimuthal um den Einfallswinkel Θ_{in} gegen eine ausgezeichnete Richtung der Oberfläche gedreht ist. Die gestreuten Projektile bilden nach ihrer Wechselwirkung mit der Oberfläche eine räumliche Streuverteilung, die mit einem Detektor im auslaufenden Strahl aufgenommen werden kann.

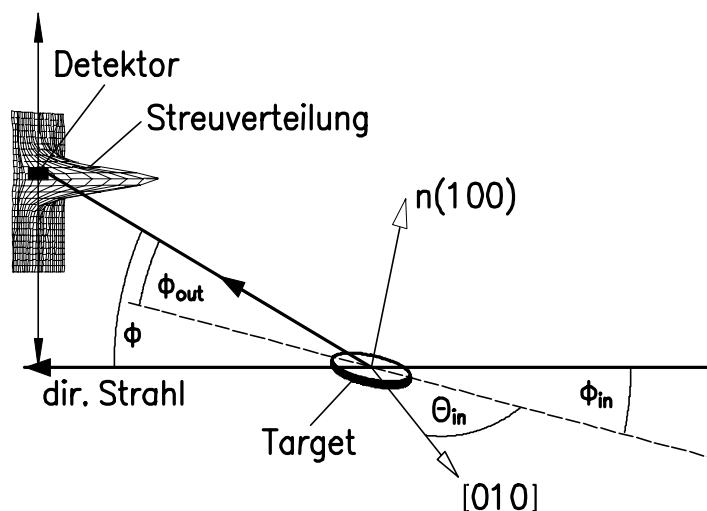


Abb. 2-1 Prinzip der streifenden Streuung

Abhängig vom konkreten Untersuchungsgegenstand genügt es in den meisten Fällen, die polare Verteilung der gestreuten Projektile in der Streuebene aufzunehmen, die einen Schnitt durch die räumliche Verteilung darstellt.

Die streifende Ionenstreuung an defektarmen Oberflächen erfolgt in der Regel in einen engen Raumwinkel. Entsprechend wird die polare Streuverteilung durch die Maximalintensität etwa beim spekularen Streuwinkel Φ_S , die Halbwertsbreite und die Form von unterspekularem und überspekularem Ausläufer charakterisiert (Abb. 2-2). Auf die spezielle Form der Streuverteilung und deren Ursachen wird im folgenden Abschnitt näher eingegangen.

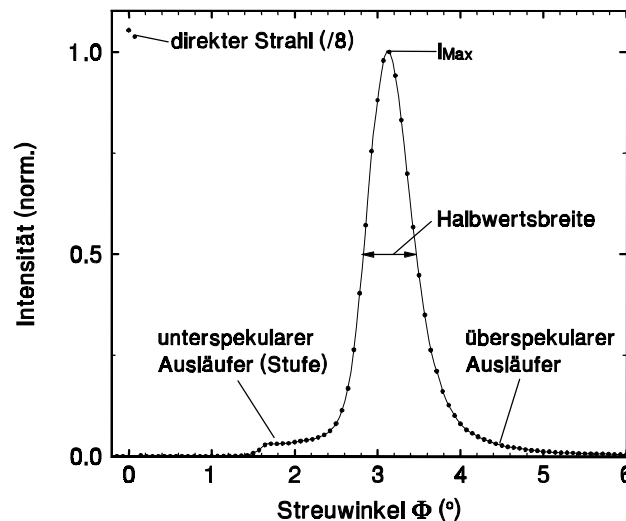


Abb. 2-2 Streuverteilung mit Bezeichnung der charakteristischen Parameter

2.1.2 EINFLUSS DER OBERFLÄCHE

Untersucht man die Wechselwirkung gestreuer Ionen mit metallischen Oberflächen, so ist es sinnvoll, morphologische und elektronische Eigenschaften der Oberfläche getrennt zu betrachten.

Aus morphologischer Sicht ist eine weitere Trennung bezüglich unterschiedlicher Defektstrukturen nötig, um aus der experimentellen Streuverteilung Rückschlüsse auf den konkreten Zustand der Oberfläche ziehen zu können.

Die elektronische Struktur spielt insbesondere für den Ladungstransfer, den Einfluß der Bildladung auf die Trajektorie sowie die Anregung von Sekundärelektronen eine primäre Rolle.

2.1.2.1 Morphologie

Eine ideale Einkristall-Oberfläche zeichnet sich durch die regelmäßige Anordnung der Oberflächenatome aus. Bei einer von den Basisvektoren der Einheitszelle aufgespannten Oberfläche ist die Idealfäche frei von Stufen und anderen Gitterfehlern. Sieht man auch von thermischen Schwingungen der Oberflächen-Atome ab, so hat man aus struktureller und morphologischer Sicht das Ideal einer Festkörper-Oberfläche. Der Streuprozess schneller Ionen unter streifendem Einfall kann dann als semiplanare Oberflächengitterführung beschrieben werden, bei der die Projektile mit einem Ensemble von Gitteratomen wechselwirken und nicht in die Oberfläche eindringen. Das planare Kontinuums-Potential, das durch Mittelung der Einzelpotentiale entlang der Oberfläche gebildet wird, ermöglicht die Beschreibung der Trajektorien mittels der eindimensionalen Integration der Newton'schen Bewegungsgleichung [SCH73]. Aus der Eindeutigkeit dieser Beschreibung erhält man für eine bestimmte Streugeometrie nur eine einzige Trajektorie, die auf eine δ -förmige "Streuverteilung" führt. Je dichter die Projektile an die Oberfläche herankommen, desto relevanter wird die Korrugation des Oberflächenpotentials entsprechend dem Kristall-Gitter [WIN96], was eine Verbreiterung der Streuverteilung zur Folge hat. Abweichungen von der idealisierten Struktur und Morphologie der Oberfläche stören die Symmetrie und führen zur weiteren Verbreiterung und Strukturierung der Streuverteilung.

Eine spezielle Änderung der Symmetrie tritt dann auf, wenn man vom planaren Channeling in hochindizierten Kristallrichtungen zum achsialen Channeling entlang niedrigindizierter Richtungen übergeht. Das achsiale Potential in Kanalrichtung führt zu Fokussierungseffekten, die eine deutliche Änderung in der Struktur der Streuverteilung hervorruft. Da die Änderung der Streuverhältnisse direkt von den geometrischen Verhältnissen eines solchen Kanals abhängt [SV83], lassen sich am Übergang vom planaren zum achsialen Channeling entsprechende Strukturinformationen gewinnen [PIW97d].

Reale Einkristall-Oberflächen besitzen stets eine Vielzahl von Defekten unterschiedlicher Dimension. Die einfachsten Störungen werden durch Null-dimensionale Defekte wie Fehlstellen oder Adatome gebildet. Auch thermisch aus ihrer Ruhelage ausgelenkte Oberflächenatome sind wegen der vergleichbar langsamen Schwingungsdauer gegenüber der Wechselwirkungszeit von Projektil und einzelner Targetatom ($<10^{-13}\text{s}$) als solche Punktdefekte zu betrachten. Größere Defekte werden durch Stufenkanten gebildet, die hauptsächlich durch die nicht zu vermeidende Fehlorientierung bei der Herstellung des Kristalls und die erodierende Präparation der Oberfläche erzeugt werden. Speziell beim Wachstum von epitaktischen Filmen treten die Inselränder als Stufen in Erscheinung.

Die Wechselwirkung der gestreuten Projektile mit solchen Defektstrukturen wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausführlich studiert und durch Vergleich mit Simulationsrechnungen quantifiziert.

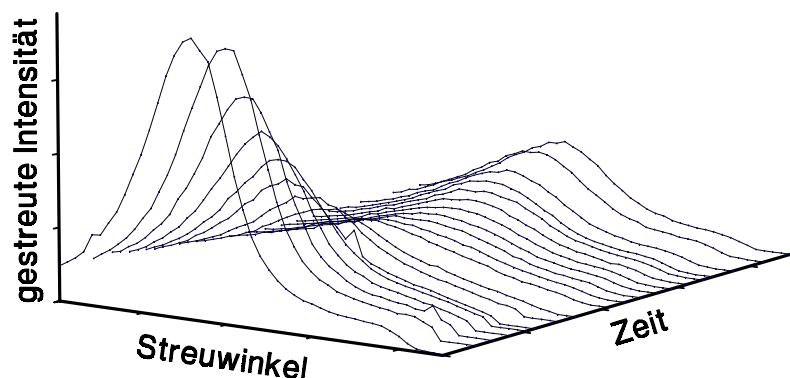


Abb. 2-3 Entwicklung der polaren Streuverteilung (25keV He^+ , $\Phi_{\text{in}}=1.75^\circ$) beim Wachstum von ca. 0.8ML Cr/Fe(100)

Insbesondere ergibt sich aus dem starken Einfluß von Oberflächendefekten auf die Streueigenschaften die Möglichkeit der Beobachtung von Wachstumsprozessen [IPW96, PIW97], die in der Regel mit erheblichen Änderungen der Oberflächenmorphologie einhergehen [BAU58]. Anschaulich wird dies in der Abb. 2-3 für das Wachstum von 0.8 Monolagen Cr/Fe(100) wiedergegeben. Die speziellen Eigenschaften dieser Methode und die daraus erhältlichen Informationen werden im Kapitel 6 näher diskutiert.

2.1.2.2 Elektronische Struktur

Bei der Wechselwirkung von atomaren Projektilen mit Einkristall-Oberflächen spielt die elektronische Struktur von Target und Projektil eine nicht zu vernachlässigende Rolle für die Trajektorie und den möglichen Ladungsaustausch.

Mit zunehmender Ladung des Projektils und abnehmender Primärenergie gewinnt

z.B. die Beschleunigung des Projektils zur Oberfläche aufgrund der Bildladung und die dadurch begründete Änderung des Streuwinkels an Bedeutung [HEC96].

Eine besondere Rolle kommt der elektronischen Struktur beim Ladungsaustausch zwischen Projektil und Target zu [AUT96]. Die Relation zwischen den elektronischen Zuständen der Oberfläche und des Projektils in Abhängigkeit von den experimentellen Streubedingungen äußert sich unter anderem in der kinematischen Abhängigkeit des Ladungstransfers [WZ88]. Neuere Untersuchungen belegen, daß unterschiedliche Bandstrukturen z.B. verschieden orientierter Cu-Oberflächen den Ladungsaustausch charakteristisch beeinflussen [HEC99]. Folglich müssen die Konzepte zur Behandlung von Ladungsaustauschprozessen an Metalloberflächen, die bisher im wesentlichen auf dem Modell des freien Elektronengases basierten, neu überdacht und weiterentwickelt werden. Entsprechende theoretische Behandlungen sind noch in den Anfängen und beziehen sich vorerst auch nur auf nichtmagnetische Oberflächen [BKG99]. Demzufolge ist eine Interpretation der Messungen zum Einfang polarisierter Elektronen von magnetischen Oberflächen bei der streifenden Ionenstreuung in Bezug auf die Bandstruktur zum jetzigen Zeitpunkt nur in Ansätzen möglich (siehe Abschnitt 5.2).

2.2 EINFANG POLARISierter ELEKTRONEN

Die magnetischen Eigenschaften von Festkörpern stehen in direktem Zusammenhang mit den unterschiedlichen Zustandsdichten von Majoritäts- ("spin-up") und Minoritätselektronen ("spin-down"). Ein Ungleichgewicht dieser Besetzung hat im Festkörper das Auftreten magnetischer Momente **M** zur Folge. Aus der Besetzung (N^\uparrow , N^\downarrow) der Zustände ergibt sich auch die Größe der Spin-Polarisation⁽¹⁾

$$P_s = \frac{N^\uparrow - N^\downarrow}{N^\uparrow + N^\downarrow}.$$

Darauf aufbauend sind in den vergangenen Jahren verschiedene Methoden entwickelt und vervollkommen worden, die aus der Analyse der Spin-Polarisation von Sekundärelektronen nach Anregung durch gestreute Atome, Ionen und Elektronen oder auch durch Photoemission Rückschlüsse auf die magnetischen Eigenschaften von Festkörper-Oberflächen gestatten [RAU82, KIR88, MAT88, SUK90].

Die in dieser Arbeit verwendete Methode des Einfangs spinpolarisierter Elektronen zeichnet sich durch eine extreme Empfindlichkeit auf die oberste Atomlage der Festkörper-Oberfläche aus. In der ursprünglichen Form wurde die Technik der "Elektroneneinfang-Spektroskopie" von Rau und Sizmann angewandt [RS73], bei der die (spinpolarisierten) Target-Elektronen bei der streifenden Streuung an Ni-Einkristall-Oberflächen in den Grundzustand von 150keV-Deuterium-Ionen eingefangen werden und die Polarisation im Projektil in einer nachfolgenden Kernreaktion nachgewiesen wird.

In ähnlicher Weise kann der Einfang polarisierter Elektronen bei der streifenden Streuung von Ionen in angeregte elektronische Zustände der Projektile studiert werden [KGS77, ZHW88]. Die dabei auftretenden Besetzungs-Anisotropien werden

¹ Die Kausalität von Spin-Polarisation und magnetischem Moment hat zur Folge, daß diese (per Definition) antiparallel ausgerichtet sind.

über die Polarisation des Fluoreszenzlichts nachgewiesen.

Diese Methode ist in vorangegangenen Arbeiten auf eine Reihe von Projektil-Target-Kombinationen und unterschiedliche atomare Terme angewendet worden, um ein besseres Verständnis für den Einfangmechanismus und die zeitliche Entwicklung der atomaren Zustände zu erlangen. Dabei kamen gleichermaßen nichtmagnetische Metall-Oberflächen (ohne spinpolarisierte Elektronen) [AFP76, WIN90, BZ96] wie auch magnetische Oberflächen zur Anwendung [WL97, LOZ97]. In der vorliegenden Arbeit wurde der Einfang polarisierter Elektronen in Fortsetzung der Untersuchungen an magnetischen Einkristall-Oberflächen [LEU94] auf das Studium der magnetischen Eigenschaften von Übergangsmetall-Filmen auf Fe(100) angewandt.

Da die Konzepte der Methode bezüglich der Kopplung von atomaren Drehimpulsen nach dem Elektroneneinfang und dessen Zusammenhang mit der Ausstrahlung von polarisiertem Fluoreszenzlicht beim Zerfall der angeregten atomaren Zustände bereits ausführlich dargestellt worden sind [KGS77, WIN92], werden im folgenden nur die für Auswertung und Verständnis der durchgeführten Messungen notwendigen Zusammenhänge wiedergegeben. Der quantitative Zusammenhang der gemessenen Polarisation mit der elektronischen Bandstruktur des Targets ist in Ermangelung der genauen Kenntnis des Ladungstransfers noch Gegenstand aktueller Diskussionen und bedarf weiterführender Untersuchungen sowohl theoretischer als auch experimenteller Natur. Dennoch lassen sich aus den Messungen maßgebliche magnetische Eigenschaften der untersuchten Metallfilme ableiten (siehe Kapitel 7).

2.2.1 NACHWEIS DER POLARISATION ATOMARER TERME

Bei der Oberflächenstreuung von schnellen Ionen werden Target-Elektronen in stabile und angeregte Terme des Projektils eingefangen. Aufgrund einer möglichen anisotropen Besetzung der atomaren Zustände können der entsprechende Bahndrehimpuls $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$ und Gesamtspin $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$ bezüglich einer Quantisierungsachse (\mathbf{z} hier senkrecht zur Streuebene) – abhängig von den spezifischen Streubedingungen und der elektronischen Konfiguration – polarisiert sein. Bezüglich dieser Quantisierungsachse \mathbf{z} ergibt sich die Bahn-Polarisation

$$P_L = \frac{\langle L_z \rangle}{L} = \frac{\sum_{M_L} M_L \sigma_{M_L M_L}}{L \sum_{M_L} \sigma_{M_L M_L}}$$

und Spin-Polarisation

$$P_S = \frac{\langle S_z \rangle}{S} = \frac{\sum_{M_S} M_S \sigma_{M_S M_S}}{S \sum_{M_S} \sigma_{M_S M_S}}$$

im Ensemble der gestreuten Projektils aus der Besetzung $\sigma_{M_L M_L}$ und $\sigma_{M_S M_S}$ der magnetischen Subzustände mit den Quantenzahlen M_L und M_S . Die magnetischen Momente aus Spin- und Bahn-Polarisation koppeln im weiteren Verlauf der Trajektorie zum Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} (LS-Kopplung).⁽²⁾ Das unter Zerfall der ange-

² Die Kopplung an den Kernspin ist für die hier durchgeführten Experimente vernachlässigbar.

regten Zustände parallel zur Quantisierungsachse ausgestrahlte Fluoreszenzlicht ist entsprechend zirkular polarisiert. Der Grad der Zirkularpolarisation wird durch den reduzierten Stokes-Parameter S/I beschrieben und kann in der Form

$$\frac{S}{I} = \frac{b_{10}P_L + b_{01}P_S}{1 + b_{11}P_LP_S}$$

dargestellt werden. Die Koeffizienten b_{ij} sind für den atomaren Übergang spezifisch und in [WIN92] für verschiedene Multipletts einer Reihe von Projektilen angegeben.⁽³⁾ An nichtmagnetischen Oberflächen ($P_S=0$) kann aus der Messung der Zirkularpolarisation des Fluoreszenzlichts streifend gestreuter Projektilen sofort auf die Bahn-Polarisation geschlossen werden. Sind sowohl P_S als auch P_L verschieden von Null, so genügt eine Einzel-Messung der Zirkularpolarisation zu deren Bestimmung nicht. Da sich aber unter Ummagnetisierung des Targets ($M \rightarrow -M$) auch die Richtung der Spin-Polarisation umdreht ($P_S \rightarrow -P_S$), ergibt sich die entsprechende Zirkular-Polarisation zu

$$\frac{\overline{S}}{I} = \frac{b_{10}P_L - b_{01}P_S}{1 - b_{11}P_LP_S}.$$

Aus der Messung von S/I und \overline{S}/I können dann sowohl P_L als auch P_S bestimmt werden.

Eine detaillierte Diskussion über die Abhängigkeit der Polarisation von den Eigenschaften der untersuchten Oberfläche, den Streubedingungen und der Wechselwirkungsdynamik wird im Abschnitt 5.2 im Zusammenhang mit den Meßergebnissen geführt.

2.3 AUGER-SPEKTROSKOPIE

Die Auger-Spektroskopie ist aufgrund ihrer elementspezifischen Sensitivität eine Standard-Methode zur Untersuchung der chemischen Zusammensetzung der obersten Atomlagen von Festkörper-Oberflächen. Gewöhnlich wird diese Methode angewendet, um die Kontamination der untersuchten Oberfläche zu charakterisieren. Da es an der Grenzfläche zwischen Substrat und Adsorbat beim heteroepitaktischen Filmwachstum durch atomare Austauschprozesse zur Durchmischung der beteiligten Spezies kommen kann, bietet die Auger-Spektroskopie ein geeignetes Mittel zur Untersuchung solcher Interdiffusionsvorgänge an ultradünnen Filmen.

Eine lagenweise Auflösung der chemischen Zusammensetzung der Oberfläche ist aufgrund der Informationstiefe, die durch die Anregungstiefe und die energieabhängige Austrittslänge bestimmt ist [FG92], in der Regel nur schwer zu erhalten. Obgleich eine Möglichkeit zur Spezifizierung der Informationstiefe in der Messung unter flachen Austrittswinkeln bzw. der Ausnutzung erhöhter Intensitäten parallel zu niedrigindizierten Kristallrichtungen bei der Elektronenbeugung besteht [DHO91, VH96], wurde in den hier vorgestellten Messungen eine andere Methode angewendet: Es wurden verschiedene Auger-Übergänge nach Anregung mit 4keV-Primärelektronen unter schrägem Einfall (33° zur Oberflächen-Normale) im nieder-

³ Für den in dieser Arbeit untersuchten Übergang gilt im untersuchten Energiebereich der Projektilen: $\text{HeI } 1s2s^3S - 1s3p^3P$ ($\lambda=389\text{nm}$): $b_{10}=b_{01}=-0.750$, $b_{11}=0.167$

energetischen (Fe- $L_{23}VV$, 47eV) und höherenergetischen Bereich (Fe- L_3VV , 703eV) ausgewertet. Diese unterscheiden sich in ihrer Informationstiefe aufgrund der verschiedenen mittleren freien Weglänge der Elektronen. Darüber hinaus wurde durch Anregung von Sekundärelektronen beim streifenden Einfall von 25keV-Protonen die Anregungstiefe reduziert. Ein Vergleich der typischen $N(E)$ -Spektren vom sauberen Fe(100)-Substrat ist in der Abb. 2-4 gezeigt. Werden die Streuverhältnisse so gewählt, daß die Projektile nicht in den Festkörper eindringen können, gelangt man – abgesehen von vernachlässigbaren Anregungen durch Sekundär-Kaskaden – zu einer auf den Bereich der obersten Atomlage begrenzten Informationstiefe [PL93, PIW98].

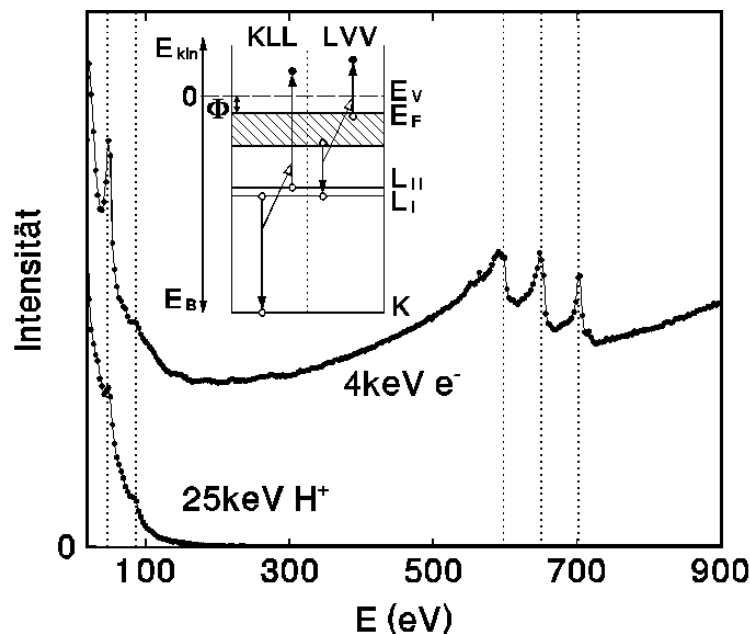


Abb. 2-4 Auger-Spektren von der präparierten Fe(100)-Oberfläche nach Anregung mit 4keV-Elektronen bzw. 25keV-Protonen. Markiert sind die niederenergetischen L_3VV -Linien bzw. die höherenergetischen $M_{23}VV$ -Linien des Fe.

Durch Vergleich dieser Auger-Signalhöhen bei unterschiedlichen Austrittstiefen kann ein lagenweise aufgelöstes Konzentrationsprofil für die obersten Atomlagen erstellt werden (siehe Kap. 6).

3 EXPERIMENT

Die Messungen wurden sämtlich in einer UHV-Streukammer durchgeführt, die für das Studium von Wachstumsprozessen mit der streifenden Ionenstreuung konzipiert und an einen Kleinbeschleuniger für Primärenergien bis zu 30keV angeschlossen ist. In der Kammer wurden Targetpräparation, Oberflächencharakterisierung unter anderem mittels streifender Ionenstreuung, Elektronenbeugung (LEED) oder Sekundärelektronenspektroskopie (AES) und die Präparation der Metallfilme durchgeführt. Zentraler Bestandteil der Messungen zu den magnetischen Eigenschaften der Oberflächen ist die Polarisationsanalyse des Fluoreszenzlichts der beim Streuprozess angeregten Projektile. Diese wurde im externen optischen Kanal mittels eines Polarisationsautomaten bzw. eines Zweikanaldetektors realisiert. Soweit den experimentellen Bedingungen eine besondere Bedeutung zukommt, werden auch diese in den folgenden Abschnitten dargelegt.

3.1 KLEINBESCHLEUNIGER

Zur Bereitstellung der Ionenstrahlen wurde ein Kleinbeschleuniger verwendet, der Primärenergien bis maximal 30keV zulässt. Er besteht im wesentlichen aus der Ionenquelle, einem 90°-Umlenkmagnet (Radius 240mm) zur Massenseparation, zwei elektrischen Quadrupolen zur Fokussierung und Plattenkondensatoren zur Ausrichtung des Ionenstrahls.

Der überwiegende Teil der Messungen wurde mit He^+ -Ionenstrahlen und die Präparation des Targets mit Ar^+ -Ionen durchgeführt. Außerdem wurden Protonen und Alkali-Ionen als Projektile verwendet. Als Ionenquelle für die Edelgas-Ionen dienten eine Penning-Quelle bzw. eine Hohlkathoden-Ionenquelle SO55 der Fa. High Voltage die gegenüber der Penning-Quelle höhere Stromdichten im Ionenstrahl liefert.

Zur Produktion von Na^+ -Ionen kam eine Feststoff-Quelle ICS-3 zum Einsatz, in der die Ionen aus der glühenden Eukryptit-Schmelze extrahiert werden.

Im günstigsten Fall ließen sich Ionenstrahlen mit Strömen von über $1\mu\text{A}$ bei 1mm^2 Strahlquerschnitt in die Streukammer transferieren.

3.2 STREUKAMMER

Die UHV-Streukammer (Abb. 3-1) ist über zwei differentielle Druckstufen, jeweils mit einer magnetgelagerten Turbopumpe TP340M der Fa. Leybold versehen, mit dem Kleinbeschleuniger verbunden. Die Druckstufen sind durch Blendenpaare bestehend aus Horizontal- und Vertikalblende mit Spaltbreiten von 0.3, 1.0 bzw. 2.0mm begrenzt, die zum einen der Reduzierung des Druckes von ca. $2 \times 10^{-6}\text{mbar}$ im Beschleunigerbereich auf einen Basisdruck von $2 \times 10^{-11}\text{mbar}$ in der Streukammer

dienen und zum anderen die Begrenzung des Ionenstrahls auf den gewünschten Querschnitt ermöglichen. Die kleinsten Blenden erlauben eine minimale Strahldivergenz von $\pm 0.02^\circ$.

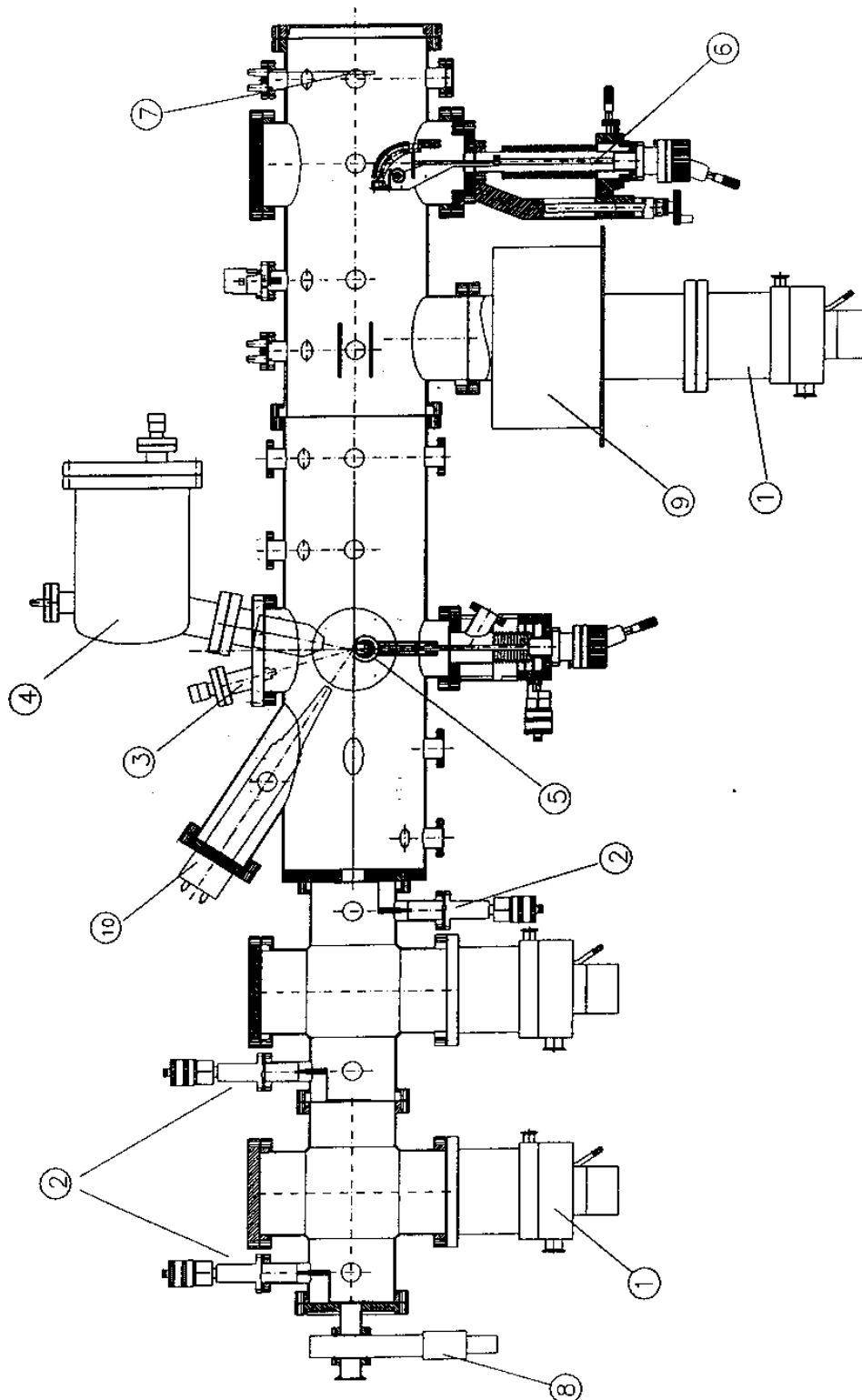


Abb. 3-1 Streukammer mit Oberflächen-Analytik: 1-Turbomolekularpumpen; 2-Blenden mit Schiebedurchführung; 3-Elektronenstrahlverdampfer; 4-Elektronenspektrometer; 5-Targethalterung mit Manipulator; 6-Channeltronmanipulator; 7-Auffangblech zur Ionenstrahlstrom-Messung; 8-Vakuumschieber; 9-Kühlfalle mit Titan-Sublimationspumpe

Mittels eines Parallelplattenkondensators in der zweiten Druckstufe können geladene

und im Restgas neutralisierte Ionen im kollimierten Ionenstrahl voneinander getrennt werden, so daß auch Streu-Experimente mit neutralen Atomen möglich waren.

In der Streukammer befindet sich die gesamte Analytik für die Experimente mit der streifenden Streuung, zur Oberflächencharakterisierung sowie zur Präparation der Metallfilme.

Das Fe(100)-Target (\varnothing 9.0mm), eingebettet in den magnetischen Kreis eines Weicheisen-Jochs, ist auf einem Präzisions-Manipulator montiert, und kann in alle Raumrichtungen verschoben, um seine Oberflächen-Normale um 360° gedreht und um max. 90° gekippt werden. So ist eine genaue Positionierung zum Ionenstrahl mit Einfallswinkeln bis zu 90° möglich. Infolge der eingeschränkten longitudinalen Bewegung des Targets kann die zentrale Streuposition allerdings nur für Einfallswinkel bis ca. 10° zur Oberfläche eingenommen werden.

Die zentrale Streuposition zeichnet sich dadurch aus, daß

- das Target in dieser Position auf der Achse von zwei Elektronenstrahlverdampfern EFM3 der Fa. Omicron liegt,
- die Elektronenkanone LEG32 der Fa. Fisons unter einem Winkel von 33° zur Ionenstrahlachse auf das Target trifft,
- das Target vor der Eintrittsöffnung des Elektronenspektrometers (CLAM2 der Fa. Fisons bzw. CSA300 der Fa. Omicron) liegt und
- das Fluoreszenzlicht der angeregten Projektile senkrecht zur Streuebene durch ein Quarz-Fenster in den optischen Kanal gelangt.

Bei den üblicherweise verwendeten Einfallswinkeln um 1.5° kann demzufolge die Streuung von Ionen, die Präparation von epitaktischen Filmen, die Fluoreszenzlichtanalyse und zum Beispiel die Auger-Elektronen-Spektroskopie gleichzeitig und *in situ* durchgeführt werden. Das ist insbesondere für das Studium der Filmeigenschaften während des Wachstumsprozesses von Bedeutung.

Die Detektion der gestreuten Projektile erfolgt in einem Channeltron X919 BL der Fa. Philips, das abgeschirmt ebenfalls an einem Präzisions-Manipulator befestigt ist, welcher die azimuthale Bewegung in der Streuebene sowie die transversale Bewegung zu dieser gestattet. Eine Lochblende (\varnothing 0.5mm) vor dem Channeltron erlaubt eine Auflösung der Streuverteilung von $\pm 0.02^\circ$ in Übereinstimmung mit der Divergenz des maximal kollimierten Ionenstrahls. Die Anordnung von Target und Channeltron ermöglichen die Aufnahme der Streuverteilung bis zu einem maximalen Streuwinkel von ca. 6° .

Hinter dem Target kann eine weitere Horizontalblende mit einem vorgesetzten Parallelplattenkondensator in die Streuverteilung eingebracht werden, um unter dem selektierten Streuwinkel den Neutralanteil der gestreuten Projektile zu bestimmen.

Das anfänglich verwendete Elektronenspektrometer CLAM2 (hemisphärischer elektrostatischer 150° -Energieanalysator) wurde im Verlauf der Arbeit durch das Zylindersegment-Elektronenspektrometer CSA300 ersetzt. Dieses bietet die Möglichkeit des Elektronentransfers in einen nachgeschalteten Spin-Detektor zur Mott-Streuung an einer W(100)-Oberfläche (SPLEED). Damit wurden Messungen zur Spin-Polarisation von Sekundärelektronen durchgeführt [OSW99, POW01].

Seitlich der Strahlachse ist ein hochauflösendes LEED (SPA-LEED) der Fa. Omicron angebracht. Für die entsprechenden Untersuchungen muß das Target demzufolge um 90° aus der Streuebene heraus verkippt werden.

Zu beiden Seiten der Strahlachse und unter einem Winkel von ca. 30° zu dieser

befinden sich ein Quarz- und ein MgF-Fenster (Grenzwellenlänge der Transmission ca. 200nm), um am 90°-verkippten Target Messungen zum magneto-optischen Kerr-Effekt (MOKE) bzw. Austrittsarbeitsmessungen (Photoemission) durchführen zu können.

Die gesamte Streukammer ist von drei Helmholtz-Spulenpaaren eingefaßt, die eine Kompensation des äußeren Erdmagnetfeldes ermöglichen. Das ist insbesondere für die Elektronenspektroskopie bei kleinen Elektronenenergien wichtig. Es hat sich allerdings gezeigt, daß eine Magnetfeldkompensation bis auf $B \approx 1 \mu\text{T}$ nur in einem kleinen räumlichen Bereich von weniger als 10cm Ausdehnung um das Target möglich ist. Die Einstellung der Spulen-Ströme erfolgte deshalb so, daß das Restmagnetfeld auf der Verbindungsachse vom Target zum Elektronenspektrometer minimal ist und die verbleibende magnetische Flußdichte in der Größenordnung von $20 \mu\text{T}$ transversal und $6 \mu\text{T}$ longitudinal zu dieser Achse liegt. Größere Restmagnetfelder werden nur in unmittelbarer Nähe der Targetoberfläche durch Streufelder vom Magnetjoch verursacht.

3.3 TARGETHALTERUNG

Das Fe(100)-Target muß dem Ionenstrahl für die Präparation azimuthal aus jeder Richtung zugänglich, bis zu seiner Curie-Temperatur von 1043K heizbar und zur Messung des Targetstroms isoliert angebracht sein. Außerdem ist für die Messungen der magnetischen Eigenschaften der Fe(100)-Oberfläche und der metallischen Filme die reproduzierbare Magnetisierung des Kristalls bis zur Sättigungsmagnetisierung notwendig. Um den Einfluß von magnetischen Streufeldern auf die Ionenstreuung zu minimieren, erfolgen die Messungen stets in Remanenz. Diese muß also für die gesamte Oberfläche möglichst gleichmäßig erreicht werden.

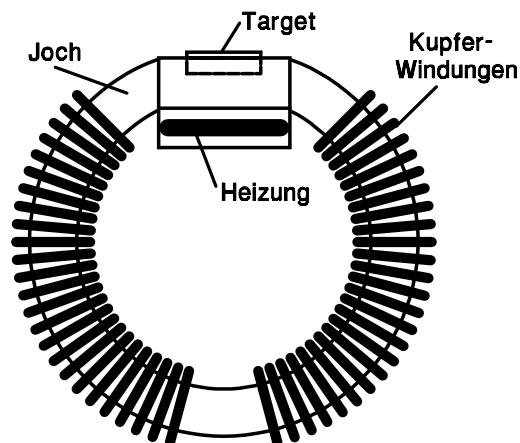


Abb. 3-2 Skizze Magnetjoch mit Targetaufnahme und Heizung im magnetischen Kreis

Zu Beginn der Arbeiten wurde das Design der Targethalterung übernommen, mit der bereits die Messungen zum Elektroneneinfang an einer Fe(110)-Oberfläche von J. Leuker an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster durchgeführt wurden [LEU94]. Sie besteht aus einem Targetaufnahme-Block aus Weicheisen VACOFLUX 50 (VAC Vacuumschmelze Hanau), in den der scheibenförmige Kristall ($\varnothing=9\text{mm}$, Dicke=3.5mm) ca. 2mm tief eingepaßt ist und der den magnetischen Kreis eines ringförmigen Jochs aus dem gleichen Material schließt (Abb. 3-2 und Abb. 3-3).

Zwischen diesem Block und den Stirnflächen des Jochs sind 0.1..0.2mm dicke Glimmer-Folien zur elektrischen und thermischen Isolierung eingebracht sowie drei Rubinkugeln zur Halterung und Positionierung im Joch eingepreßt. Das Magnetfeld im ringförmigen Joch wird von einer Spule aus 50 Windungen erzeugt. Mit einer Magnetfeldsonde (Teslameter FM320), in einen Spalt des Magnetkreises eingebracht, wurde die magnetische Flußdichte bei einem Spulenstrom von 5A zu ca. 300mT bestimmt.

Eine bifilar gewickelte Ohmsche Heizung ist unter der Targetaufnahme gekapselt angebracht.

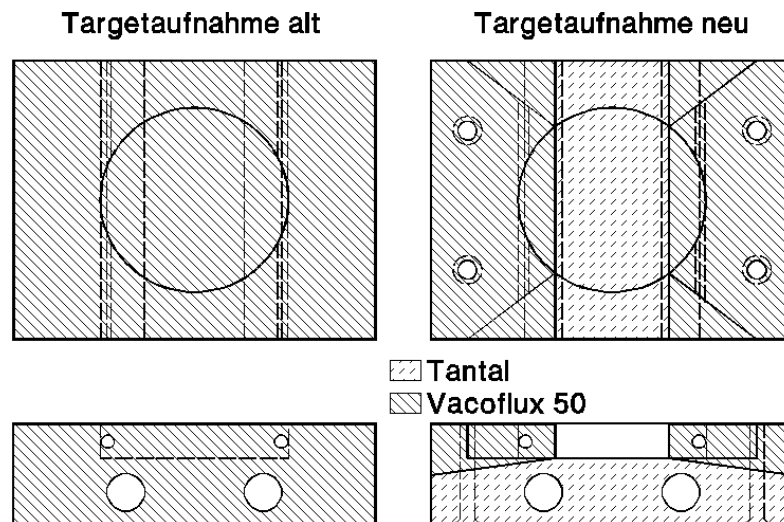


Abb. 3-3 Skizze der Targetaufnahme (links: alter Aufbau aus Vacoflux 50 mit eingefräster Vertiefung für das Target; rechts: neuer Aufbau aus Tantalunterlage und aufgesetzten Polbacken aus Vacoflux 50 zur Bündelung des magnetischen Flusses)

3.3.1 PROBENMAGNETISIERUNG

Der Fe(100)-Einkristall wurde so in der Halterung platziert, daß eine der "leichten" [100]-Richtungen für die Magnetisierung mit der Magnetisierungsrichtung des Jochs zusammenfällt. Bei der Untersuchung des Ummagnetisierungsverhaltens mittels longitudinalem MOKE zeigte sich, daß sich ein Fe(110)-Kristall mit der oben beschriebenen Anordnung leicht ummagnetisieren und in Remanenz bringen läßt (siehe alte Targetaufnahme in Abb. 3-3). Dagegen ist die Ummagnetisierung für einen Fe(100)-Kristall bekanntermaßen deutlich schwieriger [WEC98]. Ein Vergleich der verschiedenen Kristalle in einer einfachen Targetaufnahme aus einem Weicheisen-Block mit eingefräster Vertiefung zeigte nur für den Fe(110)-Kristall eine rechteckige Hysteresekurve mit reproduzierbarer Remanenz. Deshalb konnte für die Magnetisierung des Fe(100)-Kristalls nicht der gleiche einfache Aufbau wie für den Fe(110)-Kristall verwendet werden.

Um den magnetischen Fluß durch den Fe(100)-Kristall stärker zu bündeln, wurde die Targethalterung so modifiziert, daß der Kristall zwischen zwei Polbacken des magnetischen Kreises platziert ist und dieser erst durch den Kristall selbst geschlossen wird (Abb. 3-3). Mittels dieser Targethalterung konnte ein befriedigendes Ummagnetisierungsverhalten erreicht werden. Dies gilt allerdings nur für

einen engen Bereich nahe der Mittelachse entlang der Magnetisierungsrichtung. Je weiter man sich von dieser Achse entfernt, desto flacher werden die Flanken der Hysteresekurve, was auf Domäneneffekte im Zusammenhang mit der Form-Anisotropie des magnetisierten Kristalls zurückgeführt werden kann. Dennoch läßt sich eine weitestgehend gleichmäßige Magnetisierung des (100)-Kristalls reproduzierbar erreichen, wenn man den magnetischen Fluß durch Selbstinduktion stark erhöht. Das geschieht durch den Einsatz eines gepulsten Magnetisierungsstroms durch die Spule (Ein- und Ausschalten). Bei einem primären Spulenstrom von 3A ergaben sich induktive Stromspitzen von mehreren 10A. Im Rahmen der für die MOKE-Messung zugängigen Oberfläche (Entfernung des Laserspots vom Targetrand $\geq 1\text{mm}$) erhält man so in Remanenz eine einheitliche Sättigungsmagnetisierung, wobei deren Richtung gegenüber der langsam gemessenen Hysterese ($dl/dt < 0.1\text{As}^{-1}$) um 180° gedreht ist.

Neben der reproduzierbaren Magnetisierung des Targets ist für Vergleichsmessungen eine möglichst gute Entmagnetisierung erforderlich. Experimentell ist dies durch eine stetig wechselnde Ummagnetisierung der Probe zu erreichen, wobei der Magnetisierungsstrom und damit das äußere Feld bei jeder Ummagnetisierung leicht verringert wird. Damit wird die gesamte Probe in Bereiche aufgeteilt (Weiss'sche Bezirke unterschiedlicher Größe), die entgegengesetzt magnetisiert sind und in der Summe ein verschwindendes magnetisches Gesamtmoment erzeugen [CHI97]. Die Durchführung erweist sich zwar als schwierig, da das Ergebnis sowohl von der Geschwindigkeit der Ummagnetisierung (Selbstinduktionseffekte!) und dem Feldunterschied zwischen zwei aufeinanderfolgenden Magnetisierungsprozessen abhängt, dennoch konnten bei sorgfältigem Arbeiten gute Ergebnisse erzielt werden. Die Güte der Entmagnetisierung ließ sich durch gleichzeitige Aufnahme der Hysterese mittels magneto-optischem Kerr-Effekt kontrollieren und durch die anschließende Aufnahme einer "Neukurve" bei erneuter Magnetisierung überprüfen. Bei einer derartigen makroskopischen Entmagnetisierung gibt es dennoch zwei Vorzugsrichtungen für die mikroskopischen magnetischen Momente. Eine bessere Entmagnetisierung erhält man nur durch das Heizen des Kristalls über seine Curie-Temperatur, oberhalb der die magnetischen Momente ungeordnet sind. Beim nachfolgenden Abkühlen sind die mikroskopischen magnetischen Momente der Weiss'schen Bezirke entsprechend der spontanen Magnetisierung entlang aller möglichen leichten Achsen des Kristalls gleichverteilt.

Tatsächlich konnte diese Methode nur im Ausnahmefall angewendet werden, da bereits bei Temperaturen einige 10K unterhalb der Curie-Temperatur von 1045K Schwefel aus dem Kristallvolumen segregiert und die Oberfläche kontaminiert (vgl. Abschnitt 3.5).

3.3.2 STREUFELDER

Geladene Projektile werden aufgrund der Lorenzkraft in einem magnetischen Feld von ihrer geradlinigen Bewegung abgelenkt. Weiterhin wirkt ein äußeres Magnetfeld als Störung auf die angeregten atomaren Projektile nach dem Elektroneneinfang und kann deren Polarisierung ändern (z.B. Hanle-Effekt [MW91]). Deshalb müssen Streufelder des magnetischen Kreises und des Kristalls auf ein Minimum reduziert werden.

Ein geschlossener magnetischer Kreis hat bekanntlich ein vernachlässigbares Streufeld. Da der vorliegende Magnetkreis aber an der Verbindung zwischen Joch und Targetaufnahme unterbrochen ist (Glimmerfolie) und eine homogene Begrenzung des Kreises durch die Vertiefung für das Target in der Aufnahme sowie das überstehende Target selbst gestört ist, treten an diesen Stellen Streufelder aus.

Durch eine Abdeckung dieser Bereiche mit einer 0.1mm starkem μ -Metall-Hülle konnten diese Streufelder im Targetbereich zum Teil abgeschirmt werden.

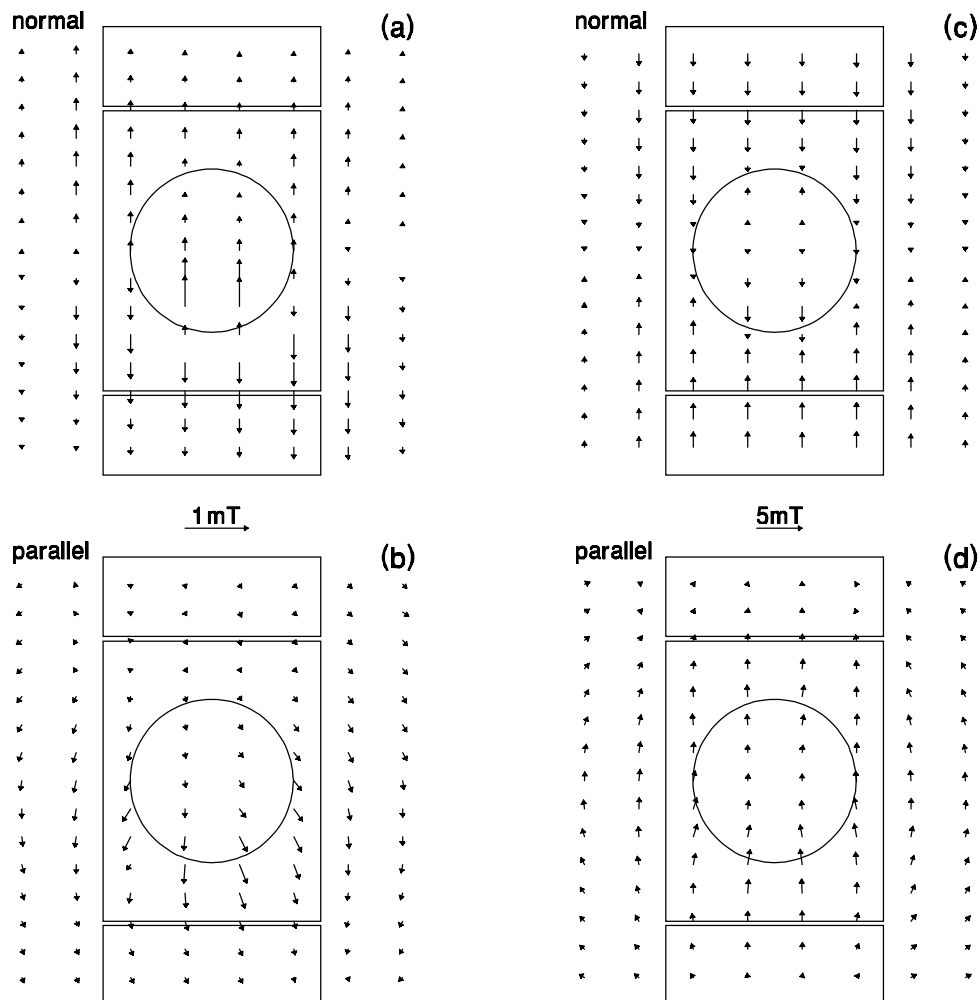


Abb. 3-4 Streufelder über Target und Targethalterung in Remanenz (a,b) bzw. bei permanentem Spulenstrom von 1A (c,d) in Richtung der Oberflächen-Normalen und parallel zur Oberfläche (siehe Text). Man beachte die unterschiedlichen Maßstäbe für die magnetische Feldstärke in Remanenz bzw. bei permanentem Magnetisierungsstrom!

Die Streufelder wurden nahe der Oberfläche mit einer Magnetfeldsonde für verschiedene Magnetisierungszustände vermessen. Ein Abstand von ca. 4mm zum Target konnte dabei wegen der Größe der Sonde nicht unterschritten werden. Der Verlauf der verbliebenen Streufelder in der Ebene parallel zur Target-Oberfläche ist in der Abb. 3-4a/b dargestellt (Probe in Remanenz). Man erkennt die Inhomogenitäten im magnetischen Kreis als Quellen und Senken des magnetischen Flusses, der senkrecht zur Oberfläche bis ca. $\pm 0.4\text{mT}$ und parallel zur Oberfläche bis ca. $\pm 0.15\text{mT}$ transversal bzw. 0.3mT longitudinal zum Magnetjoch beträgt.

Bereits bei einem permanent angelegten Magnetisierungsstrom von 1A durch die Spule verstärken sich die Streufelder auf den 4- bis 5-fachen Wert (Probe zuvor

entmagnetisiert), wobei die Isolations-Spalte zwischen Joch und Targetaufnahme die primäre Quelle und Senke des magnetischen Flusses bilden (Abb. 3-4c/d).

Man erkennt, daß die wesentliche Komponente der Streufelder im Targetbereich in Richtung des magnetischen Kreises, also auch parallel zur optischen Beobachtungsrichtung liegen. Diese sind aber für die beobachtete Zirkularpolarisation nicht von Bedeutung, solange man nicht die Zeitentwicklung der Polarisation, wie z.B. bei "quantum-beat"-Messungen, untersucht [KGS77, WIN83].

3.3.3 BESTIMMUNG DER TARGET-TEMPERATUR

Die Temperatur der Target-Oberfläche ist einer der wichtigsten Einflußgrößen auf die Wachstumseigenschaften epitaktischer Filme. Demzufolge spielt die möglichst genaue Bestimmung der Proben temperatur eine wichtige Rolle für die Einordnung der experimentellen Ergebnisse.

Da die Target-Oberfläche nicht mit einem Thermoelement kontaktiert werden darf und eine Oberflächen-Temperaturbestimmung aus der ausgesandten Infrarot-Strahlung mit vertretbarem experimentellen Aufwand im gesamten Temperaturbereich von Raumtemperatur bis über 1000K nicht möglich ist, konnte die Oberflächen-Temperatur nicht direkt gemessen werden.

Die Temperaturmessung wurde im vorliegenden experimentellen Aufbau mit einem Ni/CrNi-Thermoelement durchgeführt, das mit der Targetaufnahme dicht am Target kontaktiert ist. Da die Targetaufnahme das Wärmereservoir für das Target bildet, steht deren Temperatur in einer festen Beziehung zur Temperatur der Kristall-Oberfläche. Um diesen Zusammenhang zu ermitteln, und so aus der Temperatur der Targetaufnahme auf die Oberflächen-Temperatur der Probe zu schließen, wurde im Bereich von etwa 700K bis ca. 1050K eine Vergleichsmessung zwischen der Temperatur an der Targethalterung mittels Thermoelement und der Oberflächen-Temperatur mittels eines Infrarot-Photodioden-Thermometers IRCON Modline Plus Serie 600 durchgeführt.

Aus der Messung im Arbeitsbereich des IR-Thermometers wird deutlich, daß ein linearer Zusammenhang zwischen der Oberflächen-Temperatur und der mit dem Thermoelement gemessenen Temperatur besteht (inneres Diagramm in Abb. 3-5). Die Steigung der Geraden wird durch zwei Eich-Punkte fixiert: Bei Raumtemperatur stehen sowohl die Target-Oberfläche als auch die Targetaufnahme einschließlich Thermoelement mit der Umgebung im thermischen Gleichgewicht, woraus sich der untere Fixpunkt ergibt. Zur Bestimmung des oberen Fixpunktes wird das Fe(100)-Target schrittweise geheizt und bei Erreichen eines Gleichgewichts-Zustandes mit der Umgebung die Magnetisierung mittels magneto-optischem Kerr-Effekt kontrolliert. Das Verschwinden der Magnetisierung führt auf den zweiten Eich-Punkt bei der Curie-Temperatur von 1043K (Abb. 3-5).⁽⁴⁾ Mittels der beiden Fixpunkte von 295K und 1043K für die Oberflächen-Temperatur des Fe(100)-Kristalls konnte unter der Voraussetzung des linearen Zusammenhangs zwischen der Temperatur der Target-Oberfläche und der Temperatur am Thermoelement der Targethalterung im gesamten Temperatur-Bereich von ~300..1050K die entsprechende Korrektur der

⁴ beim Verschwinden der Magnetisierung ergab sich am IR-Thermometer aus dem Abgleich der Anzeige auf 1043K ein Emissionskoeffizient von $\alpha=0.19$.

Meßwerte durchgeführt werden. Je nach Qualität der Wärmekontakte ergaben sich bei Erreichen der Curie-Temperatur an der Oberfläche Differenzen zum Thermoelement von ca. 120..150K.

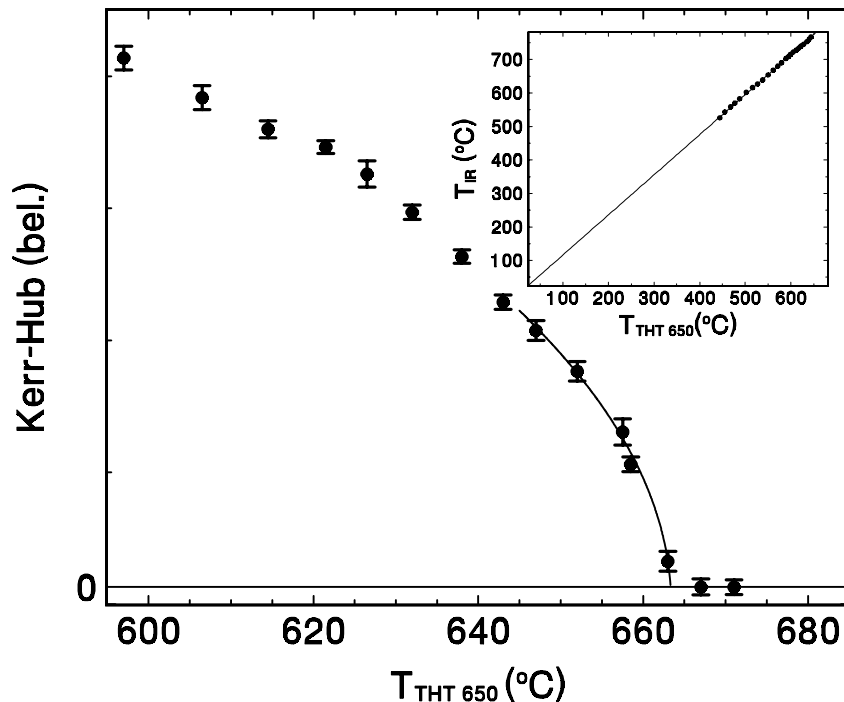


Abb. 3-5 Meßkurven zur Eichung des Thermoelements (mit Thermometer THT 650) zur Bestimmung der Oberflächen-Temperatur des Fe(100)-Kristalls: Ermittlung des Curie-Punktes mittels magneto-optischem Kerr-Effekt sowie im inneren Diagramm die Beziehung zwischen Temperatur am Thermoelement und optisch mittels IR-Thermometer bestimmter Oberflächentemperatur (siehe Text)

3.4 FLUORESZENZLICHT-ANALYSE

Das von den angeregten Projektilen ausgesandte Fluoreszenzlicht wird mit einem optischen Detektor außerhalb der UHV-Kammer analysiert. Senkrecht zur Streuebene tritt das ausgesandte Licht durch ein seitlich der Strahlachse angebrachtes Quarzfenster in den Detektor, wobei die gesamte Meßanordnung gegen Streulicht von außen abgeschirmt ist. Für die Polarisations-Analyse kamen ein Polarisationsautomat bzw. ein Zweikanal-detektor zum Einsatz. Zur Wellenlängenselektion diente ein Interferenzfilter ($\lambda=391.9\text{nm}$, Bandbreite 9.7nm, Transmission 35%) der Fa. L.O.T.-Oriel GmbH bzw. ein Czerny-Turner Monochromator Mod.218 von McPherson. Für den Nachweis des Fluoreszenzlichts wurde in der Regel ein gekühlter Photomultiplier 9635B der Dörr KG mit einem Durchmesser der Photokathode von 45mm und einer Quanteneffizienz von ca. 26.5% bei 390nm verwendet.

3.4.1 POLARISATIONSAUTOMAT

Im Idealfall ist das Fluoreszenzlicht der angeregten Projektilen in der Detektionsrichtung zirkular polarisiert. Es gilt also, den Grad der Zirkularpolarisation fest-

zustellen. Außerdem ist es zur Beurteilung der Güte der Messung sinnvoll, auch das Vorhandensein von linear polarisierten Komponenten zu prüfen. Der vollständige Satz der reduzierten Stokes-Parameter (normiert auf die Gesamtintensität I), bestehend aus S/I (Zirkularpolarisation), M/I (Linearpolarisation parallel zur Strahlachse) und C/I (Linearpolarisation unter 45° zur Strahlachse), läßt sich mit Hilfe einer drehbaren $\lambda/4$ -Verzögerungsplatte vor einem fixierten Linearpolarisator bestimmen [CLA71]. Entsprechend ist der Polarisationsautomat aufgebaut: Eine Linse (\varnothing 100mm, $f=200$ mm) sorgt für die 1:1-Abbildung des Fluoreszenzlichts aus der Detektionszone (\varnothing ca. 6cm) durch eine drehbare $\lambda/4$ -Platte (Fa. Halbo Optics, Transmission bei 390nm: 85%), einen unter 45° zur Strahlachse ausgerichteten Linearpolarisator (Fa. Melles Griot, Transmission bei 390nm: 46%, Polarisationsgrad $>99.9\%$) und durch den Interferenzfilter auf den Photomultiplier (Abb. 3-6). Der Durchmesser des gesamten optischen Kanals beträgt minimal 48mm.

Bei Drehung der $\lambda/4$ -Platte um den Winkel α zur Strahlachse mit einem idealen Linearpolarisator (Polarisationsgrad =1) gilt für die transmittierte Intensität I_T [MAR89]:

$$\frac{I_T}{I} \propto \left\{ 2 + \frac{M}{I} \sin 4\alpha (1 - \cos \varepsilon) + \frac{C}{I} [1 + \cos \varepsilon - \cos 4\alpha (1 - \cos \varepsilon)] - \frac{S}{I} 2 \cos 2\alpha \sin \varepsilon \right\}$$

wobei ε die Verzögerung der $\lambda/4$ -Platte, M die Linearpolarisation unter $\alpha=0^\circ$, C die Linearpolarisation unter $\alpha=45^\circ$ und S die Zirkularpolarisation sind.

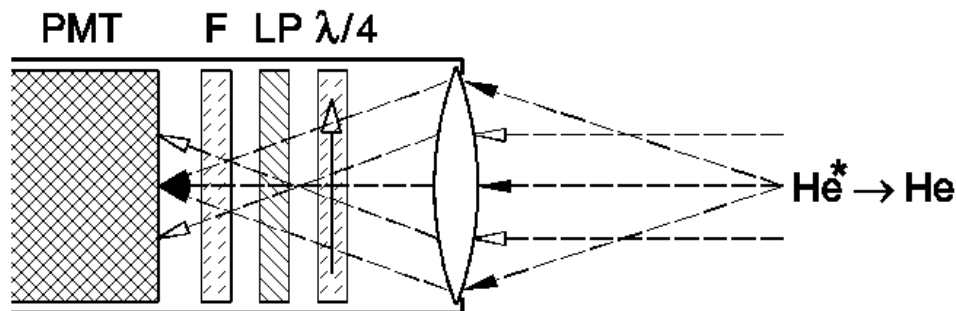


Abb. 3-6 Prinzipskizze des Polarisationsautomaten bestehend aus Eingangslinse, Verzögerungsplatte ($\lambda/4$), Linearpolarisator (LP), Schmalbandfilter (F) und Photomultiplier (PMT). Die drehbare $\lambda/4$ -Verzögerungsplatte wird durch einen Schrittmotor positioniert.

Durch acht Intensitätsmessungen mit Stellungen der $\lambda/4$ -Platte bei $\alpha=0^\circ$ und jeweils weiteren 22.5° kann der vollständige Satz der reduzierten Stokes-Parameter bestimmt werden. Insbesondere ist für die Bestimmung der Zirkularpolarisation nur die Messung der Intensitäten bei $\alpha=0^\circ$ und $\alpha=90^\circ$ notwendig:

$$\frac{S}{I} = \frac{1}{\sin \varepsilon} \frac{I(90^\circ) - I(0^\circ)}{I(90^\circ) + I(0^\circ)}$$

Hier ist die Hauptachse der Verzögerungsplatte um $\pm 45^\circ$ gegen den nachfolgenden Linearpolarisator gedreht und das zirkular polarisierte Licht wird in linear polarisiertes Licht gewandelt.

Bei bekanntem Polarisationsgrad - z.B. durch Einsatz eines zweiten Linearpolarisators - läßt sich aus der $I(\alpha)$ -Kurve außerdem der Verzögerungswinkel der $\lambda/4$ -Platte bestimmen. Dieser wurde für die verwendete Anordnung bei 390nm zu $\varepsilon=68.4^\circ$ bestimmt.

Die Gesamteffizienz des Polarisationsautomaten liegt mit den o.g. Werten ohne

Berücksichtigung des Raumwinkels der Detektion bestenfalls bei 3.6%.

Im Experiment wird die $\lambda/4$ -Platte bei der Messung der Zirkularpolarisation des Fluoreszenzlichts um jeweils 90° gedreht und die Intensitäten nacheinander gemessen. Dabei hat es sich gezeigt, daß bereits leichte Instabilitäten in der Strahlintensität zu Unsicherheiten in der Zirkularpolarisation von mehreren Prozent führen, die nur durch eine Verbesserung der Statistik mittels hohem Zeitaufwand deutlich verringert werden können. Deshalb wurde ein Zweikanaldetektor aufgebaut, der die quasi gleichzeitige Messung des Fluoreszenzlichts entgegengesetzter Helizitäten gestattet.

3.4.2 ZWEIKANALDETEKTOR

Der wesentliche Teil der in dieser Arbeit vorgestellten Polarisations-Messungen wurde mit dem Zweikanaldetektor durchgeführt, da sich dieser durch seine Stabilität gegenüber Schwankungen der Ionenstrahl-Intensität auszeichnet. Dies geht allerdings auf Kosten der absoluten Genauigkeit des gemessenen Polarisationsgrades. Um die vorgestellten Ergebnisse besser einschätzen zu können, werden deshalb nachfolgend der Aufbau und die sich daraus ergebenden Konsequenzen für die Auswertung näher erläutert.

Wie bereits festgestellt wurde, genügen für die Bestimmung der Zirkularpolarisation im Fluoreszenzlicht zwei Messungen, die sich nur durch die relative Stellung der $\lambda/4$ -Verzögerungsplatte und dem folgenden Linearpolarisator um $\pm 45^\circ$ unterscheiden. Daraus ergibt sich das Konzept des Zweikanaldetektors (siehe Abb. 3-7): Die $\lambda/4$ -Platte wird hier in einer fixierten Position gehalten. Das hindurchtretende rechtszirkular polarisierte Licht ist im Idealfall ($\epsilon=90^\circ$) dann vollständig linear polarisiert, wobei die Polarisationsrichtung gegenüber der Hauptachse der Verzögerungsplatte um -45° gedreht ist. Analog wird linkszirkular polarisiertes Licht in um $+45^\circ$ gedrehter Richtung vollständig linear polarisiert. Zur Trennung der beiden Polarisationsrichtungen kommt hier ein Polarisationsstrahlteilerwürfel aus zwei Prismen zum Einsatz (Fa. B. Halle Nachf. GmbH, BK7N für 390nm entspiegelt, Transmission: 100%, Extinktion: 2×10^{-4} für geraden Durchgang bzw. 2% für Reflexion unter 90°). Mit den nachgeschalteten Photomultipliern werden die Intensitäten in den beiden Kanälen bestimmt. Durch wechselseitige Messung in kurzen Intervallen ($\Delta t \sim 1 \mu s$) und Integration auf Gesamtmeßzeiten von ca. 1s ist eine weitgehende Entkopplung von niederfrequenten Intensitätsschwankungen im Ionenstrahl möglich. Bei nahezu gleicher Abbildung der Detektionszone (\varnothing ca. 5cm) verbessert sich gegenüber dem Polarisationsautomat auch die Zählstatistik durch die höhere Transmission des "Polarisationsfilters". Diese Vorteile sind insofern von Bedeutung für die durchgeführten Experimente, als daß z.B. beim Filmwachstum kurze Meßzeiten notwendig sind und nur kleine Ionenströme ($\sim 100 nA$) verbunden mit niedrigen Fluoreszenzintensitäten angewendet werden können (Vermeidung von Sputtereffekten).

Der wesentliche Nachteil des Zweikanaldetektors besteht in der Unsicherheit der absoluten Genauigkeit, die durch mehrere Faktoren eingeschränkt wird und in der Auswertung der Daten nur bedingt berücksichtigt werden kann:

Zur Intensitätsanalyse der polarisierten Komponenten im Fluoreszenzlicht kommen gegenüber dem Polarisationsautomat zwei Photomultiplier zum Einsatz, die sich in

der Regel in ihrer Quanteneffizienz unterscheiden. Auch die Impulshöhenverteilung der analogen Ausgangssignale der Photomultiplier kann durchaus verschieden sein, was sich auf die Signalverarbeitung im jeweiligen Vorverstärker und die Umsetzung in ein digitales Signal auswirkt. Demzufolge ist die Quanteneffizienz der beiden Meßkanäle nicht identisch. Bei Testmessungen zur Intensitätsabhängigkeit dieser "Effizienz-Unterschiede" mit verschiedenen Photomultipliern und Vorverstärkern hat sich gezeigt, daß sich das Effizienzverhältnis bei verschiedenen Photomultipliern bis zu 40% ändert, bei den typischerweise verwendeten Zählraten um 5KHz für eine feste Gerätezusammenstellung aber vergleichsweise wenig variiert (bei Änderung von ca. 1 auf 10kHz um max. 10%).

Eine weitere Unsicherheit ergibt sich aus den Abbildungseigenschaften des Detektors: Durch die Abbildung aus einem relativ großen Raumwinkel kann nicht gewährleistet werden, daß das Licht parallel durch die optischen Elemente läuft. Je nach Ausbreitungsrichtung werden die Intensitäten mit unterschiedlicher Polarisierung verschieden getrennt. Das führt zu einer Mischung der Polarisationszustände in die beiden Kanäle des Detektors. Diese Mischung wird besonders durch den Strahlteilerwürfel verursacht, dessen Extinktionswerte nur für senkrecht zur Oberfläche einfallendes Licht gelten.

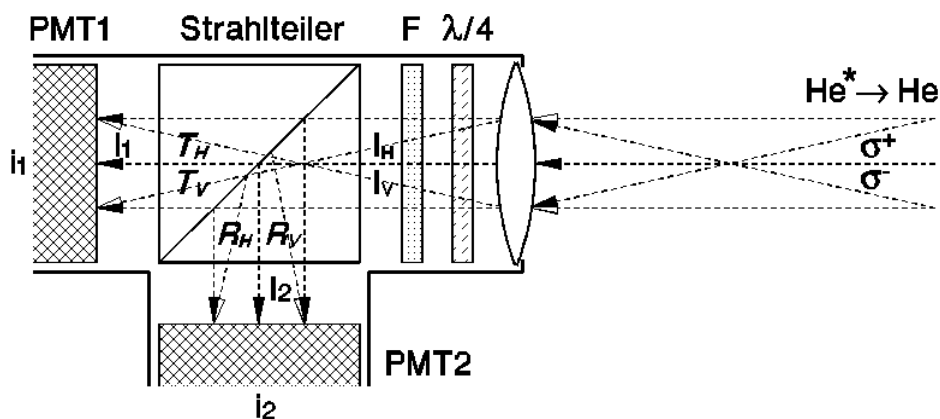


Abb. 3-7 Prinzipskizze des Zweikanaldetektors mit Strahlengang durch Eingangslinse, Verzögerungsplatte ($\lambda/4$), Schmalbandfilter (F) und Strahlteilerwürfel in die Photomultiplier (PMT1 und PMT2).

Im folgenden wird die Korrektur dieser systematischen Fehler aus den Messungen mit dem Zweikanaldetektor erläutert. Dazu betrachten wir den Polarisationsgang im Detektor (Abb. 3-7): Das einfallende Licht mit rechtszirkular polarisiertem Anteil σ^+ und linkszirkular polarisiertem Anteil σ^- tritt durch die Verzögerungsplatte und wird entsprechend in linear polarisierte Komponenten (I_H und I_V) umgesetzt. Da hier und am folgenden Interferenzfilter die Intensität unabhängig von der Polarisation entsprechend der Transmission abnimmt, bleibt der Polarisationsgrad σ erhalten:

$$\sigma = \frac{S}{I} = \frac{\sigma^- - \sigma^+}{\sigma^- + \sigma^+} = \frac{I_V - I_H}{I_V + I_H}.$$

Die linear polarisierten Komponenten werden im Strahlteilerwürfel getrennt, wobei die effektive Transmission und Reflexion für horizontal und vertikal polarisierte Strahlung (T_H , T_V , R_H und R_V) jetzt vom Einfallswinkel, also auch von der Ausrichtung des Detektors zum gestreuten Ionenstrahl abhängen. Da das BK7N-Glas des Strahl-

teilers für die verwendete Wellenlänge von 390nm quasi absorptionsfrei ist, gilt $T_{HV}+R_{HV}=1$. Bei entsprechenden Testmessungen wurden die Koeffizienten zu $T_H=0.76\pm0.04$ und $R_V=0.88\pm0.05$ ermittelt. Es erfolgt also eine Mischung der Polarisationszustände in die Detektionskanäle zu den Intensitäten I_1 und I_2 . Schließlich ist die Quanteneffizienz des jeweiligen Photomultipliers mit Vorverstärker zu berücksichtigen: $i_1=aI_1$, $i_2=bI_2$. Es gilt also:

$$\begin{pmatrix} i_1 \\ i_2 \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} aT_V & aT_H \\ bR_V & bR_H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma^- \\ \sigma^+ \end{pmatrix}.$$

Mit der am Zweikanal-detektor gemessenen Polarisation

$$\Sigma = \frac{i_2 - i_1}{i_2 + i_1}$$

ergibt sich die Zirkularpolarisation des Fluoreszenzlichts zu

$$\frac{S}{I} = \frac{a(T_V + T_H)(1 + \Sigma) - b(R_V + R_H)(1 - \Sigma)}{a(T_V - T_H)(1 + \Sigma) - b(R_V - R_H)(1 - \Sigma)}.$$

Die Quanteneffizienz der Meßkanäle wurde zunächst mittels einer genormten Lichtquelle und einem dritten Referenz-Photomultiplier bestimmt, wobei es genügt, das Effizienz-Verhältnis a/b zu bestimmen. Um auch die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten zu bestimmen wurden Vergleichsmessungen an der sauberen Fe(100)-Oberfläche mit dem Polarisationsautomat durchgeführt, wobei mit zwei unterschiedlichen Magnetisierungsrichtungen auch zwei unterschiedliche Polarisationszustände S/I und \bar{S}/\bar{I} vermessen werden (siehe Abschnitt 2.2.1). Dabei wurde die Einstellung einer möglichst identischen Streu- und Detektionsgeometrie angestrebt. Mit den gemessenen Polarisationen σ bzw. $\bar{\sigma}$ mit dem Polarisationsautomat und Σ bzw. $\bar{\Sigma}$ mit dem Zweikanal-detektor können die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten bestimmt werden:

$$T_H = \frac{\gamma(1 - \bar{\sigma})(\beta + \alpha\sigma) - \alpha(1 - \sigma)(\delta + \gamma\bar{\sigma})}{2\alpha\gamma(\sigma - \bar{\sigma})}$$

$$R_V = \frac{\gamma(1 + \bar{\sigma})(\beta + \alpha\sigma) - \alpha(1 + \sigma)(\delta + \gamma\bar{\sigma})}{2\alpha\gamma(\sigma - \bar{\sigma})}$$

wobei gilt:

$$\alpha = b(1 - \Sigma) + a(1 + \Sigma)$$

$$\beta = b(1 - \Sigma) - a(1 + \Sigma)$$

$$\gamma = b(1 - \bar{\Sigma}) + a(1 + \bar{\Sigma})$$

$$\delta = b(1 - \bar{\Sigma}) - a(1 + \bar{\Sigma}).$$

Für die Korrektur der Meßwerte wurden im Regelfall die o.g. Mittelwerte von R_V bzw. T_H verwendet. Da die effektiven Quantenausbeuten aufgrund unterschiedlicher Totzeiten abhängig von der Intensität leicht variieren, wurde für jede Messung mit dem Zweikanal-detektor das Quanteneffizienzverhältnis an der präparierten Fe(100)-Oberfläche neu bestimmt. Dabei wurde die Tatsache ausgenutzt, daß die relative Änderung von σ^+ und σ^- bei der Ummagnetisierung der Probe konstant ist. Es läßt sich leicht nachprüfen, daß dies auch für die Intensitäten nach Durchgang durch

einen absorptionsfreien Strahlteiler mit $R_V < 1$ und $T_H < 1$ gilt. Demzufolge kann aus dem Vergleich der Intensitätsverhältnisse in den beiden Meßkanälen bei Ummagnetisierung der Probe das Quanteneffizienzverhältnis bestimmt werden.

Die Restunsicherheit der korrigierten Daten wird durch die Variation von R_V und T_H in Abhängigkeit von der Abbildung des Ionenstrahls und der Intensitätsänderung während der Messung bestimmt und beträgt für die ermittelte Spin-Polarisation i.d.R. weniger als 10%.

3.5 TARGETPRÄPARATION

Für die Durchführung und Interpretation der Experimente zu Wachstum, Struktur und magnetischen Eigenschaften mit der streifenden Ionenstreuung werden hinsichtlich der Struktur und Reinheit wohldefinierte Oberflächen benötigt. Deshalb sind Präparation und Charakterisierung der verwendeten Oberflächen in hohem Maße mitentscheidend für die Qualität der Ergebnisse.

Die vorpräparierten Fe(100)-Einkristalle (U.Linke, Forschungszentrum Jülich) ($\varnothing=9\text{mm}$) mit einer Verkippung von $\leq \pm 0.02^\circ$ der Einzelkristallite gegeneinander wurden in die Targethalterung eingesetzt und unter UHV-Bedingungen in der Streukammer mehrere Wochen präpariert: Mittels Ionenätzen (Sputtern) unter streifendem Einfall ($\Phi_{\text{in}} \approx 2.5^\circ$) mit 25keV- Ar^+ -Ionen wurden Reste des Poliermittels und einige 100 Atomlagen abgetragen. Um einen gleichmäßigen Materialabtrag zu erreichen, wird das Target während des Sputterns kontinuierlich um 360° gedreht. In regelmäßigen Abständen wurden die Sputter-Zyklen durch das Heizen des Targets auf ca. 1000K unterbrochen und später auch begleitet, so daß Verunreinigungen aus dem oberen Bereich des Kristallvolumens an die Oberfläche segregieren und im nächsten Sputterzyklus mit abgetragen werden können. Zur Kontrolle des Präparationszustandes wurden wiederholt Auger-Analysen der Oberfläche durchgeführt und Streuverteilungen aufgenommen. Anschließend aufgenommene Beugungsbilder (LEED) mit scharfen 1×1 Beugungsreflexen untermauern die hohe Qualität der fertig präparierten (100)-Oberfläche [IGE96].

Auch die in den Wachstumsexperimenten präparierten Metallfilme wurden in gleicher Weise abgetragen, um die Fe(100)-Oberfläche für neue Messungen wiederherzustellen (Abtrag einer Monolage mit Ar^+ unter den o.g. Bedingungen mit $\Phi_{\text{Ar}^+} \approx 1 \mu\text{A}/\text{mm}^2$ in ca. 250s).

Die mittlere Terrassenbreite der präparierten Oberfläche hängt stark vom Ausheilprozeß ab. Zwar kann durch das streifende Ionensputtern unter Drehung des Targets um seine Oberflächen-Normale ein relativ gleichmäßiger Material-Abtrag erreicht werden, dennoch nimmt die Oberflächenrauigkeit mit der Sputterzeit zu. Der nachfolgende Ausheilprozeß zur Glättung der Oberfläche muß dementsprechend angepaßt werden. Erste deutliche Ausheil-Effekte an der gesputterten Oberfläche sind ab Temperaturen von ca. 950K zu beobachten, wobei sich mit zunehmender Temperatur und Zeit die erreichbare mittlere Terrassenbreite vergrößert. Ab ca. 1040K kommt es aber zu einer deutlichen Segregation von Schwefel an die Oberfläche. Deshalb wurden für den Ausheilprozeß Temperaturen um 1000K gewählt. Dabei wurden mittlere Terrassenbreiten von ca. 300\AA nach etwa 10min und von deutlich über 1000\AA nach etwa zwei Stunden Ausheilzeit erzielt.

Kapitel 3

Die Möglichkeit der gezielten Präparation unterschiedlicher mittlerer Terrassenbreiten kann z.B. bei der Untersuchung von Wachstumsprozessen ausgenutzt werden (siehe Abschnitt 5.1.2).

4 SIMULATIONEN

4.1 SIMULATION DES STREUPROZESSES

Die Verteilung an realen Oberflächen streifend gestreuter Ionen hängt in charakteristischer Weise von der Defektstruktur der obersten Atomlage ab. Für die quantitative Analyse der experimentellen Daten aus den Streuexperimenten und die dafür notwendige Zuordnung unterschiedlicher Defekte auf entsprechende Eigenschaften der Streuverteilung wurde von R. Pfandzelter ein Algorithmus zur numerischen Simulation des Streuprozesses entwickelt [PFA98]. Dieser stellt eine Weiterentwicklung von früheren Programmen zum Studium der achsialen Oberflächengitterführung bei der Ionenstreuung dar [GV83, SV83].

Zur Simulation der Streuverteilung werden die Trajektorien der Projektile als Abfolge von binären Stößen berechnet (Binärstoßapproximation).

Der Primärstrahl wird durch nacheinander startende Projektile mit der gleichen Energie simuliert. Die Startpunkte sind 10\AA über der obersten Atomlage gleichmäßig über die Oberflächen-Einheitszelle verteilt. Das Programm enthält einen Algorithmus, der die Gitterstruktur des halbunendlichen Fe(100)-Kristalls berücksichtigt und die freie Wahl des polaren Einfallswinkels Φ_{in} zur (100)-Oberfläche sowie des azimutalen Einfallswinkels Θ_{in} zur [001]-Richtung als Startparameter gestattet. Die Trajektorie jedes einzelnen Projektils wird als Serie von aufeinanderfolgenden Stößen mit dem jeweils am nächsten gelegenen Targetatom berechnet. Der Streuwinkel im Binärstoß wird hierbei in der Impulsnäherung ermittelt [LL63, VS75]. Die repulsive Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetatom wird durch ein geschirmtes Coulomb-Potential mit einer Näherung von Molière an die Thomas-Fermi Schirmfunktion [MOL47] und einer Abschirmlänge nach O'Connor & Biersack [OB86] beschrieben. Dieses Potential stimmt für Querenergien über 10eV gut mit dem Universalpotential von Ziegler, Biersack & Littmark [ZBL85] und dem Individualpotential von Gärtner & Hehl [GH79] überein und liegt für kleinere Querenergien zwischen diesen.

Unkorrelierte thermische Auslenkungen der Gitteratome wurden in einem harmonischen Modell berücksichtigt, wobei sich die mittlere quadratische Amplitude der Auslenkung in der Debye'schen Näherung berechnet [DS93]. Der Einfluß inelastischer Streuprozesse [KM87] ist in den Simulationen für die angewandten experimentellen Bedingungen vernachlässigbar [NME90, PSS93, WZW95].

Der Vergleich von experimentellen Daten und den entsprechenden Simulationen wird im Kap. 5.1 näher diskutiert.

Neben der Charakterisierung der Fe(100)-Oberfläche selbst wurden die Simulationen auf das Studium des Filmwachstums im Sub-Monolagen-Bereich ausgedehnt. Bei der entsprechenden Modifikation der streuenden Oberfläche im Modell wurde von einem epitaktischen und pseudomorphen Wachstum des Films ausgegangen. Dabei entwickelt sich das Wachstum der Monolagen-Inseln von geometrisch verteilten Plätzen mit einem mittleren Nukleationsabstand. Die Inseldichte bleibt während des

Wachstums konstant und die Dichte von Adsorbat-Monomeren wird als vernachlässigbar klein vorausgesetzt. Die mittlere Inselgröße ergibt sich aus der aktuellen Bedeckung. Unter Anpassung des Nukleationsabstandes als einzigen freien Fitparameter für einen festen Satz experimenteller Parameter konnten sowohl Formen als auch Intensitäten der Streuerverteilungen beim Sub-Monolagen-Wachstum gut reproduziert werden (siehe Kap. 6).

Zugunsten kürzerer Rechenzeiten wurde die Zahl der zu berechnenden Trajektorien für eine Streuerverteilung je nach Zweck auf ein möglichst niedriges Niveau von $10^4 \dots 10^6$ Projektilen beschränkt (Zeitaufwand etwa 1h für 10^5 Trajektorien). Mit etwa 1% der Teilchen im Maximum der Streuerverteilung wurde eine ausreichende Statistik zur Abbildung der charakteristischen Größen der Streuerverteilung erreicht.

4.2 WACHSTUM UND INTERDIFFUSION

Für die Interpretation der Experimente zum Wachstum der 3d-Metall-Filme auf der Fe(100)-Oberfläche ist ein geeignetes Modell notwendig, das die kontinuierliche Entwicklung der Oberfläche hinsichtlich der Struktur und Zusammensetzung in Abhängigkeit vom Wachstumsmodus beschreibt. Insbesondere das Auftreten von Interdiffusionsvorgängen beim heteroepitaktischen Wachstum erfordert für die Analyse von Daten aus extrem oberflächensensitiven Meßmethoden eine Beschreibung, die bei jeder Bedeckung Θ die chemische Zusammensetzung oberflächennaher Atomlagen wiedergibt. Dabei ist der Füllungsgrad der einzelnen Filmlagen von grundlegender Bedeutung, die Größe und Verteilung der Adsorbat-Inseln spielt dagegen nur indirekt eine Rolle. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Wachstumsmodell erarbeitet, das diese Aufgabe erfüllt.

Die Grundlage bildet zunächst ein "birth-death"-Modell für das Wachstum auf niedrigindizierten Einkristall-Oberflächen, das von Cohen *et al.* zur Analyse von RHEED-Oszillationen entwickelt wurde [CPP89]. Hier erfolgt die Beschreibung der lagenweisen Bedeckungen Θ_n durch nichtlineare Differentialgleichungen der Form

$$\frac{d\Theta_n}{dt} = \left(\frac{1}{\tau}\right)(\Theta_{n-1} - \Theta_n) + k(\Theta_{n+1} - \Theta_{n+2})(\Theta_{n-1} - \Theta_n) - k(\Theta_n - \Theta_{n+1})(\Theta_{n-2} - \Theta_{n-1})$$

mit der Wachstumsrate $1/\tau$ Monolagen je Sekunde und dem Interlagentransportparameter k . Der erste Term beschreibt den Zuwachs in der Lage n durch Deposition ohne Diffusion über Terrassenkanten. Dieser ist proportional zum unbedeckten Anteil der darunterliegenden Atomlage ($\Theta_{n-1} - \Theta_n$). Die beiden folgenden Terme beschreiben den Interlagentransport durch Diffusion über Terrassenkanten. Dabei steht der erste dieser Terme für den Zuwachs der Bedeckung in der Lage n aus der Lage $n+1$ und der zweite für den Verlust aus der Lage n in die Lage $n-1$. Die Dynamik des Systems spiegelt sich zum Einen in der Wahl des Transportparameters k und zum Anderen in der Eigenschaft des "birth-death"-Verhaltens wider, das die Skalierung der einzelnen Prozesse mit der zur Verfügung stehenden Fläche beinhaltet. Mit den Randbedingungen $\Theta_0(t)=1$ (Substrat-Oberfläche), $\Theta_{n>0}(0)=0$ und $\Theta_{\infty}(t)=0$ lassen sich die Bedeckungen Θ_n einfach berechnen. Als Beispiel ist die Entwicklung der Bedeckung für die ersten Lagen in der Abb. 4-1 für $k=10$ bzw. $k=100$ gezeigt.

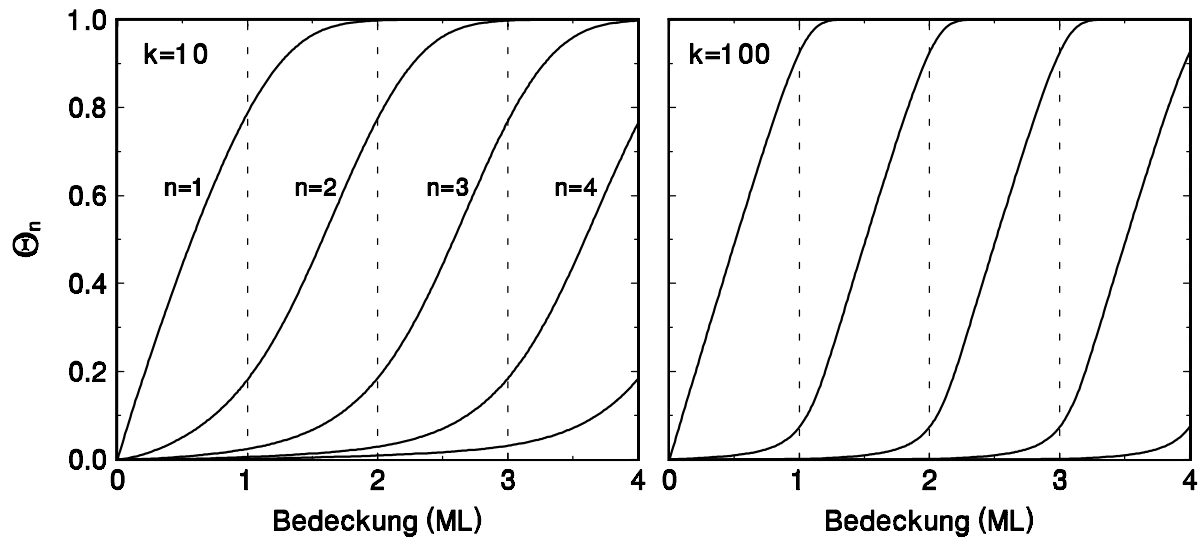


Abb. 4-1 Lagenweise Bedeckungen Θ_n beim Wachstum mit unterschiedlichen Transportparametern k nach dem "birth-death"-Modell (siehe Text). Die Nummern an den Einzelkurven kennzeichnen die entsprechende Filmlage beginnend mit Eins für die erste Adsorbat-Lage.

Wie aus dem Füllungsgrad der einzelnen Lagen bei ganzzahligen nominellen Bedeckungen und dem Auftauchen deutlich sichtbarer Bedeckungen in höheren Ebenen leicht zu erkennen ist, steigt die Tendenz zum lagenweisen Wachstum mit der Größe des Transportparameters k . Da aus den Streuexperimenten der Füllungsgrad zumindest zu Beginn des Wachstums abgeschätzt werden kann, ist speziell aus dem Vergleich mit dem Modell-Ergebnis $\Theta_1(\tau)$ der Parameter k leicht anzupassen.

Aus der Darstellung des Lagenwachstums in der Abb. 4-1 sind bereits wesentliche Informationen zu gewinnen, die bei der Interpretation Oberflächen-sensitiver Messungen zu beachten sind, wenn sich die gemessenen Eigenschaften von Lage zu Lage ändern können. So ist bei einer beliebigen Bedeckung neben der absoluten Füllung der einzelnen Lagen beispielsweise der Anteil einer jeden Lage an der aktuellen Oberfläche abzulesen: Es läßt sich bei beliebiger Bedeckung Θ unterscheiden, welcher Teil einer Lage n noch nicht gefüllt ist (oberhalb der Bedeckungs-Kurve der Lage n) und welcher Teil dieser Lage zwar gefüllt, aber bereits durch die folgende Lage wieder bedeckt wurde (unterhalb der Bedeckungs-Kurve der Lage $n+1$). Damit ist der unbedeckte Anteil einer Lage n zu jedem Zeitpunkt als der Bereich zwischen der Kurve n und der Kurve $n+1$ zu identifizieren. Dieser unterscheidet sich insbesondere für unterschiedliche Transportparameter k deutlich gegenüber dem reinen Füllungsgrad der Lagen (Abb. 4-2).

Um neben der reinen Bedeckung nun auch die chemische Zusammensetzung eines heteroepitaktischen Systems mit Interdiffusion zu berechnen, wurde das Simulations-Programm um eine entsprechende Prozedur erweitert. Bei der Beschreibung der Austauschprozesse wurden zwei unterschiedliche Regime getrennt. Im ersten Schritt findet ein Wechsel zwischen den frei auf den Terrassen beweglichen Atomen (Adsorbat) und den in den Terrassen eingebundenen Substratomen (Fe) statt. Diese Interdiffusion wird durch die deponierte Adsorbatmenge selbst sowie die Konzentrationen des Adsorbats auf der Terrasse ($=1$) und im unbedeckten Bereich

der Terrasse (d.h. in der für die laterale Diffusion zur Verfügung stehende Fläche) $c_{\text{offen},n-1}$ bestimmt:

$$\frac{d\Theta_{n/(n-1)}}{d\tau} \propto (1 - c_{\text{offen},n-1}) \frac{1}{\tau} (\Theta_n - \Theta_{n-1})$$

Da ein solcher Austausch für die hier untersuchten Systeme nach den Berechnungen von Nonas *et al.* [NWZ98] keine neuen Nukleationszentren bildet, wird der Intragagentransport nicht wesentlich beeinflusst und das Wachstum setzt sich von den gebildeten Inseln entsprechend den sich einstellenden Konzentrationsverhältnissen fort.

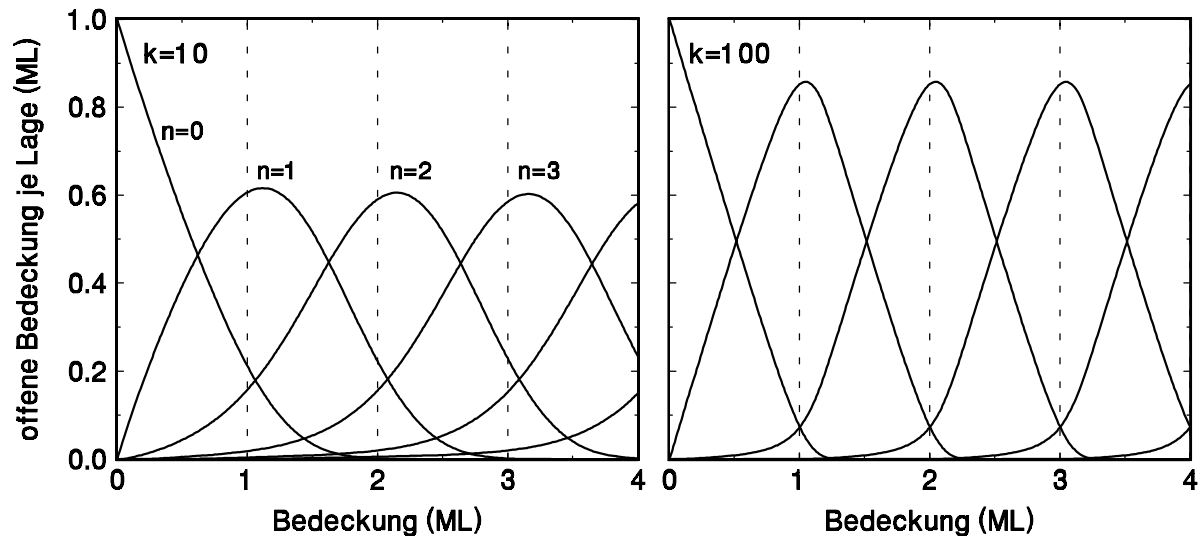


Abb. 4-2 Unbedeckter Anteil je Lage beim Wachstum mit unterschiedlichen Transportparametern k nach dem "birth-death"-Modell entsprechend der Abb. 4-1. Die Lage "0" kennzeichnet die Substrat-Oberfläche.

In einem zweiten Schritt wird auch die Interdiffusion zwischen der Oberflächen-Lage und dem darunterliegenden Bereich in analoger Weise berücksichtigt. Diese ist nun nicht mehr an frei bewegliche Adatome an der Oberfläche gebunden, hängt aber ebenfalls von dem aktuellen Konzentrationsunterschied des Adsorbat-Materials in den beteiligten Lagen und dem offenen Flächenanteil ab. Dabei ist zu beachten, daß aufgrund der Anzahl der Bindungen ein Platzwechsel von Atomen in geschlossenen Bereichen mit einer geringeren Wahrscheinlichkeit gegenüber dem vorher betrachteten Austausch von frei beweglichen Adatomen mit Atomen der Oberflächenlage auftritt. In tieferen Lagen wird die Interdiffusion aufgrund des mit der Tiefe schnell abnehmenden Konzentrationsgradienten und der ausschließlichen Transportmöglichkeit über Zwischengitterplätze oder Gitterfehlstellen vernachlässigt. Neben der Abhängigkeit der Interdiffusion von den entsprechenden Konzentrationsunterschieden wird hier wie bei der Beschreibung des Wachstums ein Transportparameter eingesetzt, der die Funktion einer "Löslichkeit" des Adsorbats im Substrat übernimmt und somit an das spezielle heteroepitaktische System gebunden ist.

Da in diesem Modell der vollständige Aufbau des Systems bezüglich Bedeckung und Konzentrationen simuliert wird, können leicht der Anteil jeder Lage zur aktuellen Oberfläche bzw. zu einer bestimmten Tiefe unter der Oberflächenlage berechnet werden.

Aus dem Beispiel mit $k=10$ der Abb. 4-2 ist unter Einbeziehung der Interdiffusion neben der insgesamt zur Verfügung stehenden offenen Fläche in jeder Lage zusätzlich die Aufteilung in den Anteil der Substrat-Atome und der Adsorbat-Atome möglich, welcher in der Abb. 4-3 oben dargestellt ist.

Deutlich zu erkennen ist der Einbau von Adsorbat-Atomen in die freie Substrat-Oberfläche ($n=0$) sowie die sukzessive Abnahme des Substratanteils an der Oberfläche (Bereich zwischen durchgezogener und gestrichelter Linie) mit jeder weiteren Film-lage. Ähnlich verhalten sich die Anteile in den bedeckten Bereichen je Lage. Die daraus ermittelten Adsorbat-Konzentrationen sind im mittleren Teil der Abb. 4-3 gezeigt.

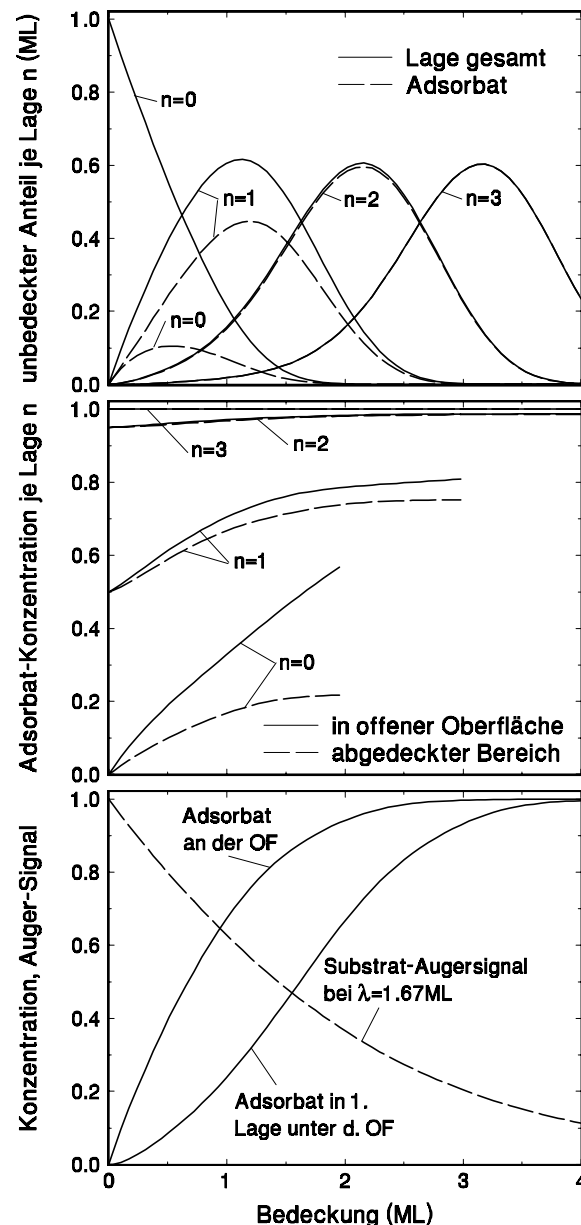


Abb. 4-3 Beispiel-Ergebnisse einer Simulation zum Wachstum nach dem Birth-death-Modell ($k=10$) unter Einbeziehung der Interdiffusion von Adsorbat und Substrat (siehe Text)

In dem Unterschied der Adsorbat-Konzentration zwischen den offenen und bereits durch die nächste Ebene abgedeckten Bereichen spiegelt sich die erhöhte Wahrscheinlichkeit für den Platzwechsel von Atomen der obersten Lage mit frei beweglichen Adatomen gegenüber dem Wechsel eingebundener Atome wider.

Zur Veranschaulichung ist im unteren Teil der Abb. 4-3 als Beispiel die Zunahme des Adsorbat-Anteils an der aktuellen Oberfläche gezeigt. In diesem Modell befinden sich also etwa ab einer nominellen Bedeckung von 3..3.5ML keine Substrat-Atome mehr in der Oberfläche.

In der Simulation kann nun leicht die Zusammensetzung auch für die 1. Lage unter der Oberfläche (aktuelle Tiefe $t=1\text{ML}$, siehe Abb. 4-3 unten), der 2. Lage ($t=2\text{ML}$), usw., sowie die entsprechenden Adsorbatkonzentrationen $c_{A,t}$ dieser Lagen ermittelt werden, um daraus auf einfachem Weg z.B. das Auger-Signal des Substrats für beliebige Austrittstiefen $\lambda[\text{ML}]$ nach

$$\frac{I_A}{I_0} = \sum_{t=0}^{\infty} (1 - c_{A,t}) \exp(-t/\lambda) \text{ mit } I_0 = \sum_{t=0}^{\infty} \exp(-t/\lambda)$$

zu ermitteln. Als Beispiel ist in der Abb. 4-3 unten die Abnahme des Auger-Signals vom Substrat bei einer Informationstiefe von $\lambda=1.67\text{ML}$ dargestellt. Aus der Angleichung des Modells an die experimentellen Ergebnisse ergeben sich dann die zu verwendenden Transportparameter für die Interdiffusion.

Eine wesentliche Stütze des Modells ist die sukzessive Berechnung der Bedeckung und des entsprechend aktuellen Auger-Signals analog der Messung im Experiment. Aus der so ermittelten Entwicklung der Zusammensetzung von Oberfläche und abgedeckten Bereichen können in Abhängigkeit vom Wachstumsmodus Rückschlüsse auf die Verteilung der Spezies innerhalb der Lagen als Funktion der Bedeckung gezogen und die Messungen zum Einfang polarisierter Elektronen von diesen Oberflächen bezüglich der magnetischen Eigenschaften interpretiert werden.

5 UNTERSUCHUNGEN AN Fe(100)

Die Fe(100)-Oberfläche bildet das Substrat für alle in dieser Arbeit durchgeführten Messungen. Deshalb wurde diese Oberfläche besonders hinsichtlich ihrer strukturellen und magnetischen Eigenschaften untersucht sowie die verwendeten Meßmethoden an dieser Oberfläche getestet. Dabei wurden eine Reihe neuer Erkenntnisse gewonnen, die sowohl das Potential der streifenden Oberflächen-Streuung ausleuchten als auch weiterführende methodischen Studien zum Ladungsaustausch und insbesondere zum Einfang polarisierter Elektronen von magnetischen Oberflächen anregen.

5.1 IONENSTREUUNG AN Fe(100)

Die (100)-Oberfläche des bcc-Fe (α -Modifikation) ist durch die Anordnung der Oberflächen-Atome in einem quadratischen Gitter mit der Gitterkonstanten $a_{\text{Fe}}=2.88\text{\AA}$ gekennzeichnet. Diese Struktur ist bis 1184K stabil und geht oberhalb davon in die fcc-Struktur (γ -Modifikation) über. Die Stufenhöhe an Terrassenkanten ist durch den vertikalen Abstand benachbarter Netzebenen von $1/2a_{\text{Fe}}=1.44\text{\AA}$ gegeben.

Unter Ausnutzung der Sensitivität streifend gestreuter Ionen auf die geometrische Struktur der Oberfläche wurde die Fe(100)-Oberfläche hinsichtlich ihrer Morphologie charakterisiert.

5.1.1 FOKUSSIERUNGSEFFEKTE AM $\langle 001 \rangle$ -KANAL

Am Übergang vom planaren zum achsialen Channeling in niedrigindizierten Richtungen wird aufgrund der Fokussierung im Kanal die Zahl der Wechselwirkungen mit den Gitteratomen erhöht, was eine Änderung der Sekundärelektronen-Emission zur Folge hat. Diese kann im Experiment durch die Messung des Targetstroms bei azimuthaler Drehung des Targets zum Ionenstrahl nachgewiesen werden (Abb. 5-1a). Die Breite der aus den jeweiligen Richtungen resultierenden Strukturen skaliert dabei sowohl mit dem reziproken Atomabstand in Kanalrichtung, als auch mit der Projektilmasse [SV83], wie man am Vergleich der Streuung von Ar^+ und He^+ sieht. Während am aufgenommenen Targetstrom bei der Streuung von Ar^+ ein Fokussierungseffekt durch die Reihe der zweiten Lage nur im $\langle 001 \rangle$ -Kanal sichtbar ist, sind die Fokussierungseffekte bei der Streuung von He^+ an den darunterliegenden Atomreihen auch in anderen Richtungen deutlich sichtbar. Ähnliche Strukturen findet man bei der Aufnahme der spekulär gestreuten Projektile. In Abb. 5-1b ist dies für die Streuung von He^+ gezeigt. Hier führt die Streuung an den Atomreihen im Kanal zu einer Verringerung der Intensität in der Streuebene und unterschiedliche Fokussierungseffekte werden je nach Anordnung der Atome im jeweiligen Kanal als entsprechende Strukturen sichtbar.

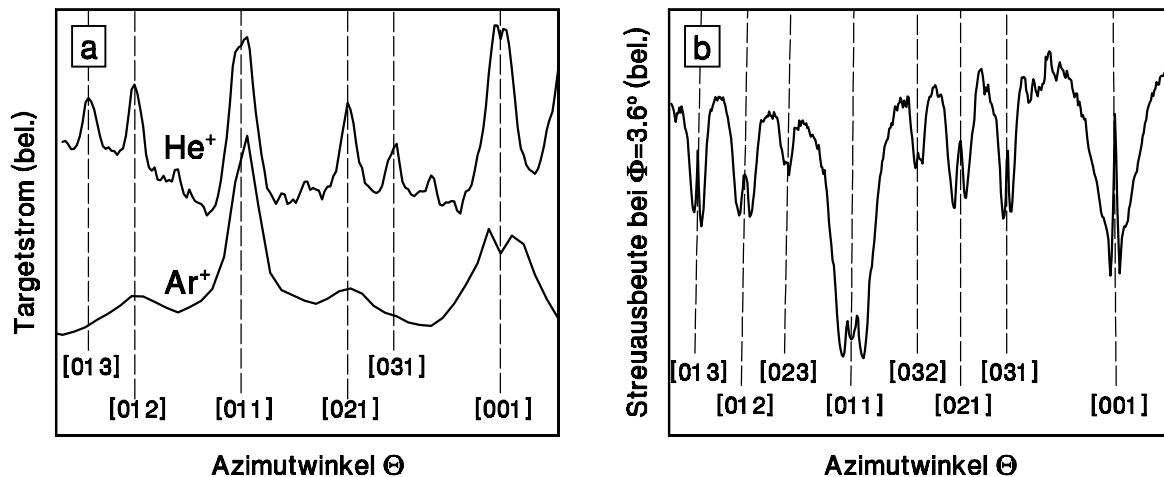


Abb. 5-1 (a) Targetstrom bei Streuung von 25keV He⁺ ($\Phi_{in} \sim 1.7^\circ$) bzw. Ar⁺ ($\Phi_{in} \sim 2.5^\circ$) unter Drehung des Fe(100)-Kristalls um seine Oberflächen-Normale und (b) Streuausbeute bei Streuung von 25keV He⁺ ($\Phi_{in} \sim 1.7^\circ$) bei $\Phi \sim 3.6^\circ$ unter Drehung des Fe(100)-Kristalls um seine Oberflächen-Normale.

Der Fokussierungseffekt im Bereich des $\langle 001 \rangle$ -Kanals der Fe(100)-Oberfläche wurde detailliert mittels Aufnahme zweidimensionaler Streuverteilungen unter Variation der Streugeometrie untersucht.

Beim teilweisen Eindringen der Projektile in den Oberflächen-Kanal werden diese in den sich überlappenden Potentialen der angrenzenden Atomreihen fokussiert. Entsprechend dem Verhältnis der Transversalenergien der Projektile zu den streuenden Atomreihen parallel bzw. senkrecht zur Oberfläche (im Bereich einiger eV) und den dadurch bedingten "zick-zack"-Trajektorien [SFV96] weist die Streuverteilung eine bananenförmige Gesamtstruktur mit einer multimodalen Intensitätsverteilung auf. Die Umverteilung der Intensität durch Änderung der Fokussierungsbedingungen wird bei der ausschließlichen Variation der Senkrechterenergie deutlich (Abb. 5-2a). Da die Struktur der Streuverteilung empfindlich auf die minimale Annäherung der Projektile an die Oberfläche ist, sollte es möglich sein, den Potentialverlauf zur Beschreibung der Projektil-Oberflächen-Wechselwirkung in der Nähe der Oberfläche zu untersuchen. Erste Ansätze dazu liefern Simulationen der Streuung unter Channeling-Bedingungen mittels klassischen molekulardynamischen Rechnungen [DRS91] von Danailov [DAN99], die die gemessene Struktur der Streuverteilungen bezüglich der Peak-Positionen und der Intensitätsverteilung gut wiedergeben (Abb. 5-2b).

Hier wird die elastische Streuung mittels zweidimensionaler Reihen-Potentiale beschrieben, die aus der Überlagerung der interatomaren Potentiale entlang der streuenden Atomreihen gebildet werden. Zur Beschreibung der interatomaren Wechselwirkung wurde einerseits das "Individual"-Potential von Gärtner und Hehl [GH79] herangezogen, das auf der quasistatischen Beschreibung der Wechselwirkung von zwei freien Atomen unter Berücksichtigung der elektrostatischen, kinetischen und Austausch-Energie beruht und deren Elektronendichten aus den atomaren Wellenfunktionen bestimmt werden. Im Gegensatz zum gemittelten "Universal"-Potential von Ziegler, Biersack und Littmark [ZBL85], wird hier der elektronischen Schalenstruktur der individuellen Atome Rechnung getragen.

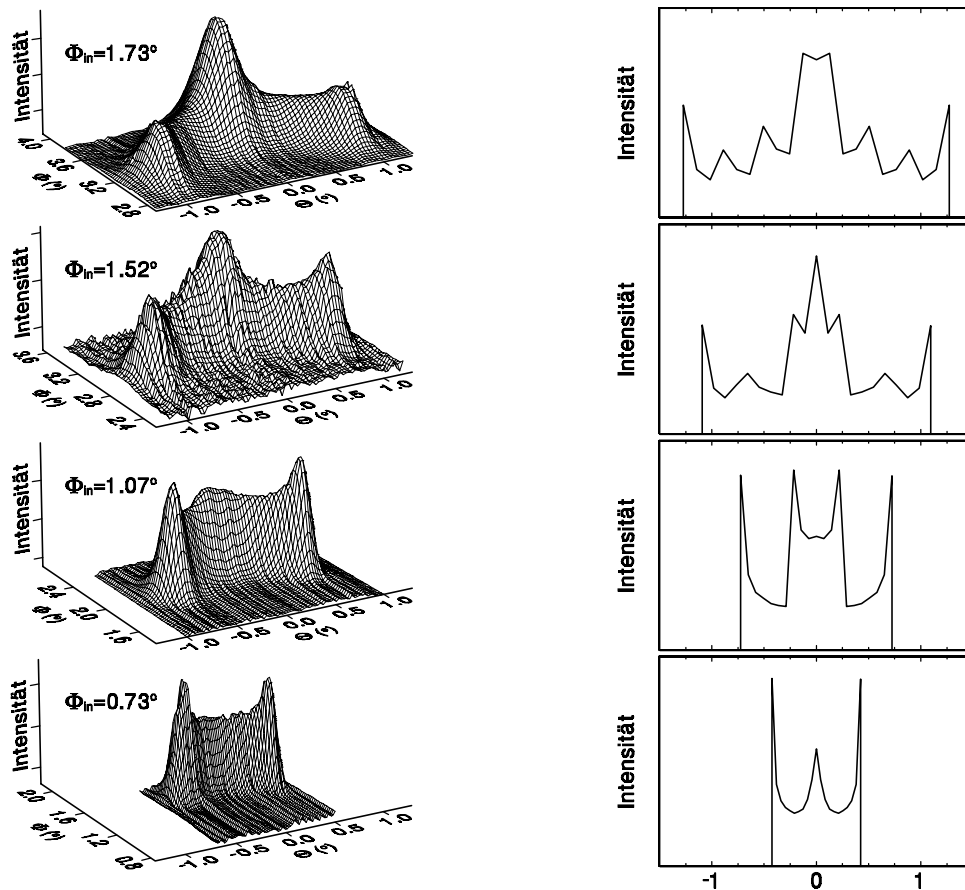


Abb. 5-2 (a-links): Streuverteilungen von 10keV He^0 bei Streuung in $\langle 001 \rangle$ -Richtung an Fe(001) für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} ; (b-rechts): Simulation der Intensitätsverteilung mit molekulardyn. Rechnungen unter Verwendung des "Individual"-Potentials (siehe Text, T=0) [DPI00]

Obgleich in den aktuellen Simulationen die Verbreiterung der Streuverteilung durch thermische Schwingungen (siehe Abschnitt 5.1.3) unberücksichtigt ist, werden aus der Differenz der verwendeten Potentiale im hier relevanten Bereich von ca. $1..2\text{\AA}$ Abstand (vgl. Abb. 5-3) Unterschiede für die Struktur der Streuverteilung sichtbar (vgl. Abb. 5-2).

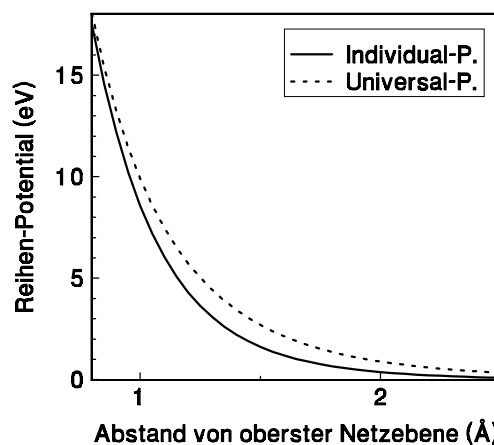


Abb. 5-3 Vergleich der Potentiale entlang der Atomreihe im $\langle 100 \rangle$ -Kanal der Fe(001)-Oberfläche unter Verwendung von "Individual"-Potential [GH79] und "Universal"-Potential [ZBL85] für die interatomare Wechselwirkung He-Fe [DAN99]

Noch deutlicher werden diese Unterschiede beim Übergang vom achsialen zum

planaren Channeling (Abb. 5-4), der analog den Untersuchungen zur Streuung im $\langle 001 \rangle$ -Kanal unter verschiedenen (azimutalen) Einfallswinkeln analysiert und mit den Simulationen von D.M. Danailov unter Anwendung der verschiedenen Potentiale verglichen wurde (vgl.

Abb. 5-5). Während bei der Streuung parallel zur Kanalrichtung die gestreute Intensität aufgrund der Spiegelsymmetrie gleichmäßig zu beiden Seiten der Streuebene verteilt ist, verschwindet die multimodale Struktur mit zunehmender Abweichung der Streuebene von der $\langle 001 \rangle$ -Richtung. Die unsymmetrische Verteilung der Intensität bei azimutalen Einfallswinkeln um $\Theta = 0.6^\circ \dots 1.2^\circ$ wird hier von der Asymmetrie der Streuparameter im Kanal verursacht. Bei einem azimutalen Einfallswinkel von $\Theta_{in} = 15^\circ$ erhält man dagegen eine für das planare Oberflächen-Channeling typische, nahezu gaußförmige Streuverteilung [WIN92a] mit geringerer Halbwertsbreite.

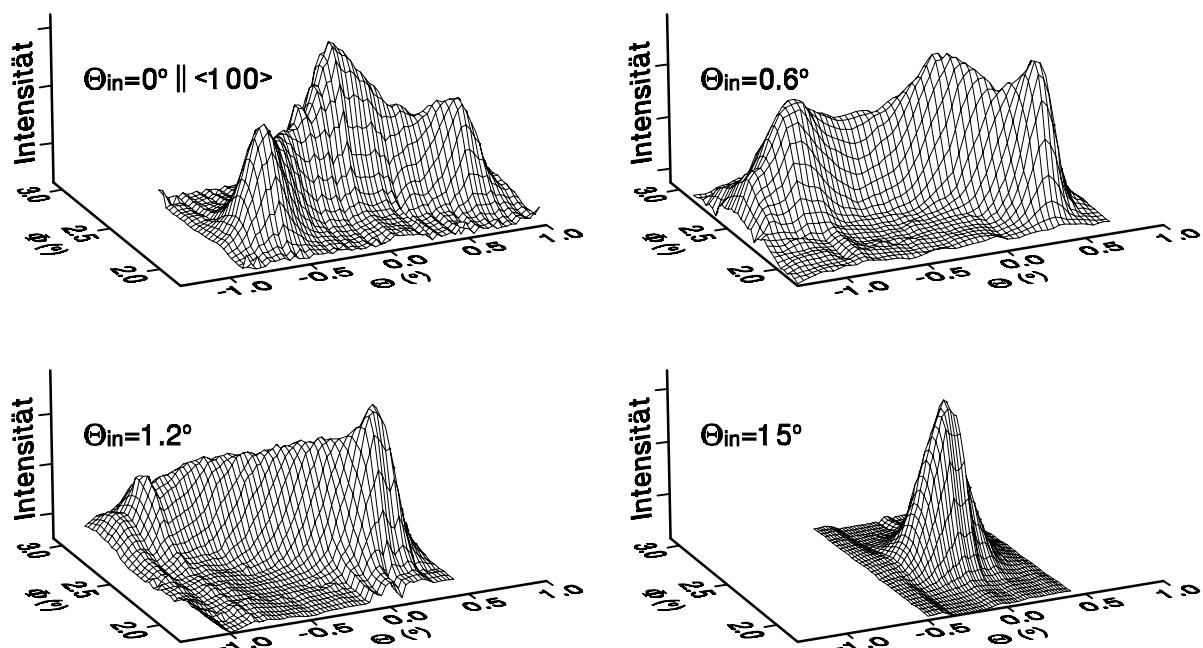


Abb. 5-4 Streuverteilungen von 15keV He⁰ bei Streuung unter verschiedene Einfallswinkeln Θ_{in} zur $\langle 001 \rangle$ -Richtung der Fe(100)-Oberfläche, $\Phi_{in} = 1.16^\circ$

Aus der Entwicklung der Spekular-Intensitäten in der Streuebene für verschiedene azimutale Einfallswinkel wird deutlich, daß der Fokussierungseffekt zur Bestimmung der Kanalrichtung ausgenutzt werden kann. Symmetrisch zur $\langle 001 \rangle$ -Kanalrichtung nimmt die spekulare Intensität beim Übergang von der planaren Streuung zum achsialen Channeling zunächst ab und wird bei der Streuung entlang dem Kanal bei geeignetem Einfallswinkel durch die Fokussierung an der Atomreihe der zweiten Lage wieder erhöht. Diese Intensitätserhöhung durch Fokussierung tritt am $\langle 011 \rangle$ -Kanal wegen der fehlenden Reihe in der zweiten Lage nicht auf, was zur Ausbildung eines einfachen Minimums in der spekularen Streuausbeute bei der Streuung entlang dieser Richtung führt (vgl. Abb. 5-1b).

Detaillierte Studien der winkelabhängigen Streuverteilung - vorzugsweise bei möglichst tiefen Temperaturen, um "Verschmierungen" der multimodalen Strukturen zu minimieren - und die Berücksichtigung thermischer Schwingungen in der Simulation, ermöglichen die Bestimmung eines genaueren Potentialverlaufs in Oberflächen-Nähe [DPI01].

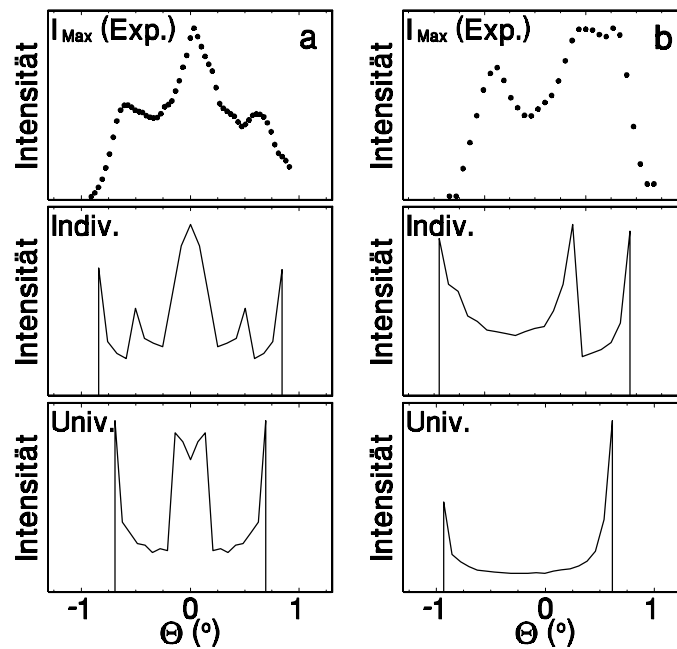


Abb. 5-5 Vergleich von experimenteller Streuverteilung und berechneter Struktur der Streuverteilung [DAN99] mit "Individual"-Potential und "Universal"-Potential: a) He^0 , 15keV, $\Phi_{\text{in}}=1.18^\circ$, $\Theta=0^\circ$ (parallel $\langle 001 \rangle$); b) He^0 , 15keV, $\Phi_{\text{in}}=1.16^\circ$, $\Theta=0.6^\circ$

Für die in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen von Defektstrukturen bzw. des Filmwachstums mittels streifender Ionenstreuung auf der Fe(100)-Oberfläche wurde generell die Geometrie des planaren Channeling gewählt, da die Streuung unter diesen Bedingungen bereits sehr gut durch Monte-Carlo-Computersimulationen beschrieben werden kann (siehe unten bzw. Abschnitt 4.1) und die spekulare Streuausbeute maximal ist.

5.1.2 TERRASSEN

Die an realen Oberflächen auftretenden Stufen beeinflussen den Streuprozess bei der streifenden Ionenstreuung. Im Abschnitt 4.1 wurde anhand der Simulation der Streuverteilung gezeigt, daß die Terrassenstruktur der Oberfläche einen unterspekularen Ausläufer der Streuverteilung verursacht. Bei genauerer Untersuchung des Zusammenhangs von Oberflächen-Stufen und der unterspekularen Streuung stellt man fest, daß die entsprechenden Trajektorien aus der Wechselwirkung mit Abwärtsstufen in der Nähe des Wendepunktes der Projektile resultieren: Die plötzliche Verringerung des repulsiven Potentials beim Passieren einer Abwärtsstufe führt zu kleineren Streuwinkeln (Abb. 5-6).

Da die Verringerung des Streuwinkels für eine Annäherung des Wendepunktes entlang der Streurichtung an die Oberflächen-Stufe von beiden Seiten erfolgt (Verringerung des lateralen Stoßparameter b zur Stufe) und die Projektile wegen der kleinen Einfallswinkel nicht in die Oberfläche eindringen können, existiert stets ein Minimum für den Streuwinkel Φ (d.h. $d\Phi/db=0$). Dieser als Regenbogenstreuung bezeichnete Effekt [KH91] konnte als leichte Intensitätserhöhung der Streuausbeute etwas oberhalb des halben Streuwinkels bei der Streuung an der gestuften Fe(100)-Oberfläche experimentell nachgewiesen werden [PKI98]. In der Abb. 5-7 ist dies für zwei verschiedene Streuwinkel dargestellt.

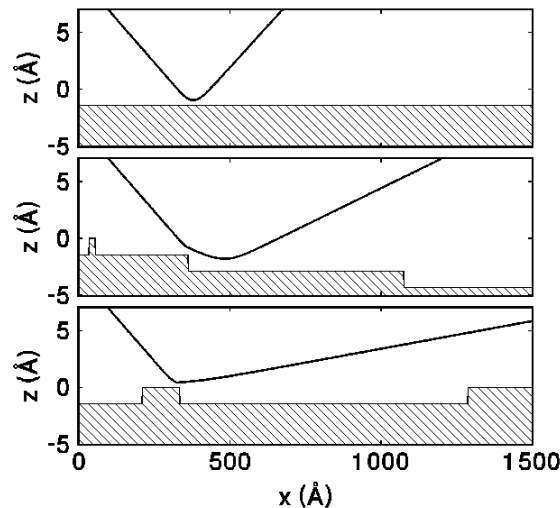


Abb. 5-6 Berechnete Trajektorien beim Passieren einer Abwärtsstufe [PFA98]

Der Anteil, der in den unterspekularen Ausläufer gestreuten Projektile, ist durch die Wahrscheinlichkeit der Wechselwirkung mit einer Stufenkante im Bereich des Wendepunktes der Trajektorie bestimmt. Da die Trajektorien gleichmäßig über die Oberfläche verteilt sind, ist die relative Intensität von unterspekular zu spekulär gestreuten Teilchen ein Maß für die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit mit einer Stufe und somit für den mittleren Abstand der Stufen. Beachtet man die Tatsache, daß nur Abwärtsstufen entlang der Streurichtung zu der unterspekularen Streuung führen, so ist für die Bestimmung der Terrassenbreiten wesentlich, ob es sich bei der untersuchten Oberfläche tatsächlich um eine niedrigindizierte Oberfläche im eigentlichen Sinn mit einer im Mittel gleichmäßigen Verteilung von Auf- und Abwärtsstufen handelt, oder ob sie analog einer höherindizierten Oberfläche einseitig gestuft ist [HAW98]. Experimentell läßt sich das durch Aufnahme der Streuverteilung unter Variation des azimuthalen Streuwinkels um bis zu 360° überprüfen.

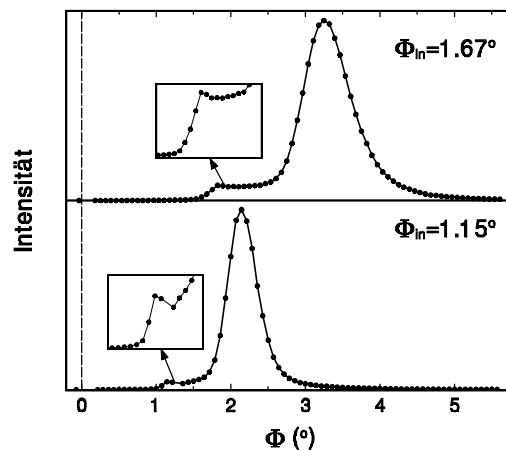


Abb. 5-7 Regenbogenstreuung von 25keV He^+ an der Fe(100)-Oberfläche für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in}

Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Kristall konnten für unterschiedliche Präparationsstadien keine signifikanten Unterschiede für die Struktur der Streuverteilung bei unterschiedlichen azimuthalen Streuwinkeln festgestellt werden, was eine gleichmäßige Verteilung von Auf- und Abwärtsstufen in der Terrassenstruktur untermauert. Aus dem Vergleich der simulierten und gemessenen Streuverteilungen

kann so einerseits auf die mittlere Terrassenbreite geschlossen werden (Abb. 5-8). Andererseits wird dadurch belegt, daß durch Variation von Ausheiltemperatur und -dauer verschieden stark gestufte Oberflächen gezielt präpariert werden können (siehe Abschnitt 3.5).

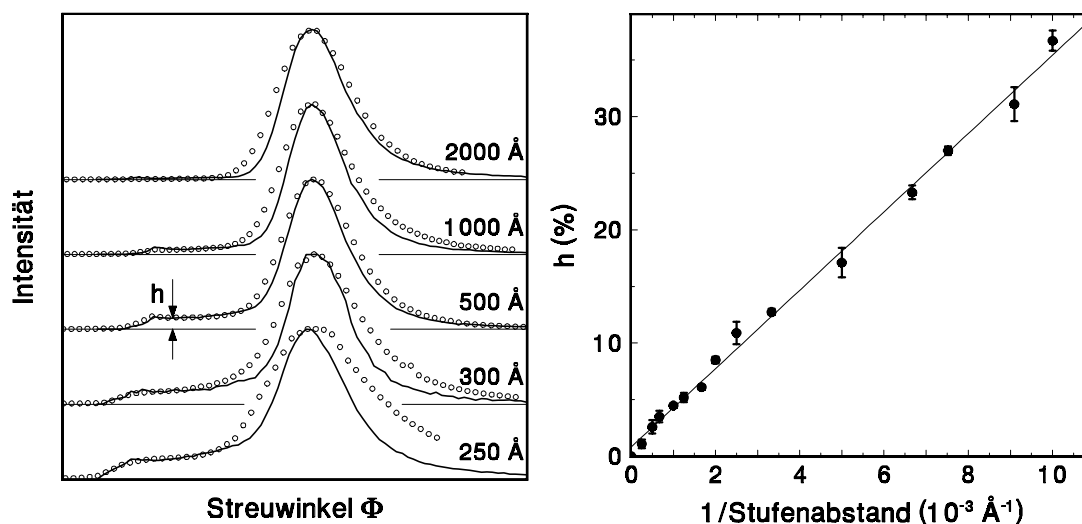


Abb. 5-8 links: Vergleich von berechneten und gemessenen Streuverteilungen für verschiedene mittlere Terrassenbreiten (25keV He⁺, $\Phi_{\text{in}}=1.7^\circ$, T=600K). rechts: Zusammenhang zwischen der relativen Höhe des unterspekularen Ausläufers im Vergleich zur Spekular-Intensität mit der mittleren Terrassenbreite (Berechnung der Streuverteilungen von R. Pfandzelter).

Für mittlere Terrassenbreiten $\gg 1000 \text{ Å}$ ist diese Methode allerdings wegen der verschwindenden Intensität im unterspekularen Ausläufer gegenüber der Spekularintensität nicht mehr geeignet. Sie ist in ihrer Sensitivität also durchaus mit der hochauflösenden Elektronenbeugung (SPA-LEED, Transferbreiten bis ca. 2000 Å) vergleichbar [LEU94, HOE99], zeichnet sich aber durch ihren vergleichbar geringen Zeitaufwand für Messung und Auswertung aus.

5.1.3 THERMISCHE SCHWINGUNGEN

In der Vergangenheit sind thermische Eigenschaften unterschiedlicher fcc-Metall-Oberflächen mit verschiedenen Methoden, wie der Streuung thermischer Atome, Röntgen- oder Elektronen-Beugung untersucht worden [z.B. CC90, HGB93, FB95]. Mit der streifenden Streuung schneller Ionen lassen sich ebenfalls Oberflächengitterschwingungen studieren [PIW97a], da deren Schwingungsfrequenzen (typ. $10^{11} \dots 10^{14} \text{ Hz}$) [HG94] deutlich unter den Wechselwirkungsfrequenzen des Projektils mit den Targetatomen (typ. 10^{16} Hz) liegen. Folglich "sieht" ein gestreutes Projektil die durch thermische Schwingungen aus ihrer Ruheposition verschobenen Atome in einem "eingefrorenen Zustand". Diese Störungen im planaren Potential der Oberfläche spiegeln sich in der Halbwertsbreite der Streuverteilung wider (vgl. Abschnitt 2.1.2.1) und lassen sich entsprechend analysieren. Der Vorteil der streifenden Ionenstreuung bei planarer Gitterführung liegt z.B. gegenüber Beugungsmethoden in der Empfindlichkeit nur auf die oberste Atomlage und der vergleichbar einfachen Simulation des Streuprozesses. Insbesondere ist eine deutliche Trennung des Einflusses von Oberflächen-Stufen und thermischen Schwingungen auf die Struktur

der Streuverteilung möglich: Während die Stufen der Oberfläche vorrangig den unterspekularen Ausläufer der Streuverteilung verursachen, führen die thermischen Schwingungen zu einer näherungsweise symmetrischen Verbreiterung des Spekular-Peaks mit einem Ausläufer in überspekulare Streuwinkel. Damit können der Einfluß von Ausheileffekten und thermischen Schwingungen auf die Breite der Streuverteilung bei der Temperatur-Variation voneinander separiert werden.

Die thermischen Schwingungen der Oberflächen-Atome können in einem harmonischen Modell als gaußförmig verteilte Verschiebungen aus der Ruheposition beschrieben werden. Die mittleren quadratischen Auslenkungen $\langle u_{\perp}^2 \rangle$ und $\langle u_{\parallel}^2 \rangle$ senkrecht bzw. parallel zur Oberfläche ergeben sich aus dem Debye-Modell mit den Oberflächen-Debye-Temperaturen T_{\perp}^S und T_{\parallel}^S mittels

$$\langle u_{\perp/\parallel}^2 \rangle = \frac{3\hbar^2 T}{Mk(T_{\perp/\parallel}^S)^2},$$

wobei M die Masse eines Oberflächen-Atoms ist [GLA55]. Mit steigender Temperatur zeigt sich im Experiment die erwartete Zunahme in der Halbwertsbreite der Streuverteilung (Abb. 5-9).

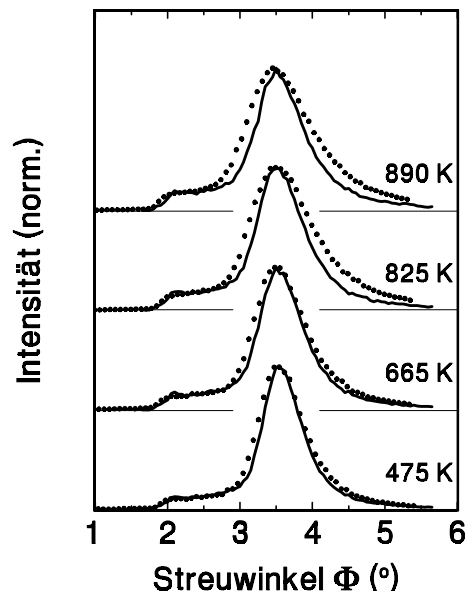


Abb. 5-9 Experimentelle Streuverteilungen von 25keV He^+ , $\Phi_{\text{in}}=1.85^\circ$ an einer gestuften Fe(100)-Oberfläche bei verschiedenen Temperaturen (Symbole) im Vergleich mit berechneten Streuverteilungen (Linien) mit $T_{\perp}^S=227\text{K}$ (Rechnungen von R. Pfandzelter).

Durch den Vergleich mit den entsprechenden Simulationen findet man, daß die Verbreiterung der Streuverteilung maßgeblich auf die Schwingungen der Atome normal zur Oberfläche zurückzuführen ist. Bei genauerer Betrachtung sieht man eine gute Übereinstimmung der unter Verwendung der von Jackson für Fe(100) angegebenen Oberflächen-Debye-Temperatur von $T_{\perp}^S=227\text{K}$ [JAC74] berechneten und den gemessenen Streuverteilungen nur für die tieferen Temperaturen. Für höhere Temperaturen wachsen die Halbwertsbreiten im Experiment deutlich stärker an, wobei der unterspekulare Ausläufer bei Oberflächen mit verringerter mittlerer Terrassenbreite unbeeinflusst bleibt. Folglich treten hier größere thermische Auslenkungen auf, als durch das harmonische Modell beschrieben werden. Entsprechend der Position eines Oberflächen-Atoms an der Grenze des Festkörpers zum Vakuum

kann hier symmetriebedingt ein anharmonischer Anteil im effektiven Potential der Einzelteilchen zum Tragen kommen. Um diesen Effekt adäquat in einer harmonischen Näherung zu beschreiben, wird die Oberflächen-Debye-Temperatur als Funktion der Target-Temperatur variiert (vgl. Abb. 5-10a). Aus den so ermittelten Oberflächen-Debye-Temperaturen kann dann die entsprechende mittlere thermische Auslenkung berechnet werden (Abb. 5-10b). Man erkennt, daß sich bei einer Temperatur von 900K die mittlere quadratische Auslenkung aus der Oberfläche gegenüber dem harmonischen Ansatz etwa verdoppelt hat. Die so ermittelte mittlere Auslenkung bei 900K von

$$\sqrt{\langle u_{\perp}^2 \rangle} \Big|_{900\text{K}} = (0.30 \pm 0.02) \text{Å}$$

beträgt bereits ca. 20% des Lagenabstandes der Fe(100)-Oberfläche! Entsprechend ist es plausibel, daß etwas oberhalb dieser Temperatur Ausheilprozesse einsetzen (vgl. Abschnitt 3.5), die eine erhöhte Wahrscheinlichkeit für das Lösen der Oberflächen-Atome aus ihrer Gitterposition voraussetzen.

Analoge Messungen an einer deutlich glatteren Oberfläche mit mittleren Terrassenbreiten von $\gg 1000 \text{Å}$ erbrachten die gleichen Ergebnisse, wonach ein Einfluß der Stufendichte auf die beobachteten thermischen Gitterschwingungen vernachlässigbar ist.

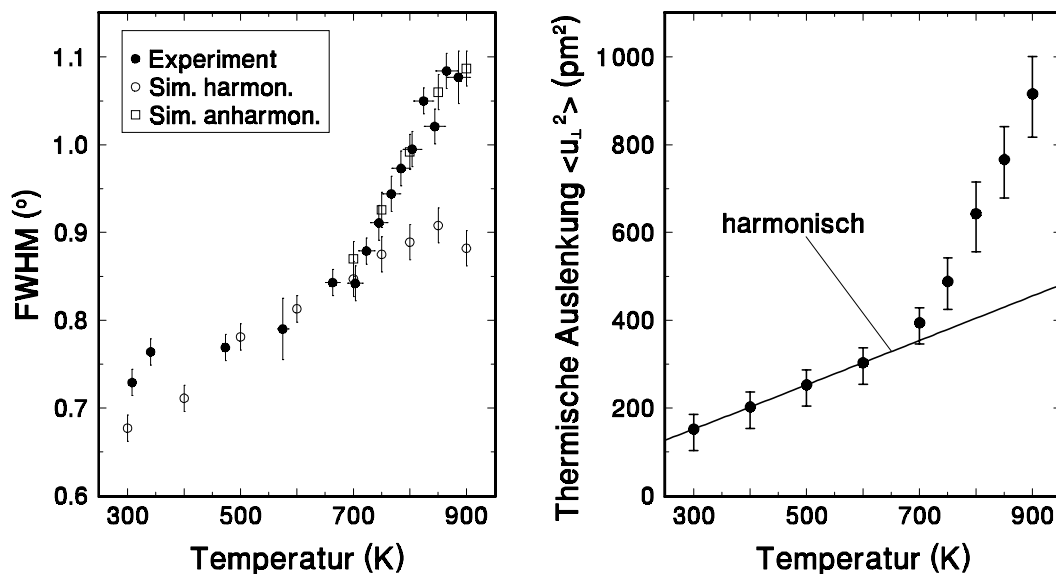


Abb. 5-10 (a) Halbwertsbreiten der gemessenen (geschlossene Symbole) und simulierten Streuverteilungen (Streueung wie in Abb. 5-9, offene Kreise: $T_{\perp}^S = 227 \text{K}$, offene Quadrate: T_{\perp}^S zur Beschreibung der Anharmonizität angepaßt) und (b) die daraus bestimmten mittleren quadratischen Auslenkungen senkrecht zur Oberfläche [PIW97a].

5.2 EINFANG POLARISierter ELEKTRONEN VON DER Fe(100)-OBERFLÄCHE

Entsprechend der kubischen Anisotropie liegen im bcc-Fe die Achsen der spontanen Magnetisierung ("leichte Achsen") entlang der [100]-Richtungen [CRA 95]. Wird also entlang einer dieser Richtungen ein externes Magnetfeld angelegt und die

Koerzitivfeldstärke überschritten, so wird der Kristall abgesehen von Randeffekten (Form-Anisotropie!) in dieser Richtung vollständig remanent magnetisiert (siehe Abschnitt 3.3.1).

Die magnetischen Eigenschaften der Fe(100)-Oberfläche werden durch die Messung der Spin-Polarisation P_s gemäß Abschnitt 2.2 charakterisiert, die aus der Polarisation des Fluoreszenzlichts der an der Oberfläche gestreuten Ionen/Atome ermittelt wird. Der funktionale Zusammenhang zwischen der gemessenen Spin-Polarisation der angeregten Atome und der Magnetisierung \bar{M} ist bis jetzt nicht genau bekannt. Obgleich in verschiedenen Studien bereits eine Reihe von Projektil-Target-Kombinationen an magnetischen Oberflächen untersucht worden sind [ZHW88, WIN92, LW93, WL97, NDM98], mangelt es noch an der theoretischen Beschreibung des Einfang-Prozesses. Die Ursachen liegen sowohl in der bisher nicht verfügbaren Spin- und $k_{||}$ -aufgelösten Bandstruktur der untersuchten Oberflächen als auch in der Komplexität der Wechselwirkung zwischen gestreutem Projektil und Festkörper.

Es werden zunächst Messungen an der sauberen Fe(100)-Oberfläche vorgestellt, an denen auf der Grundlage bisheriger Vorstellungen vom Oberflächen-Magnetismus [BH94] die Abhängigkeit der Spin-Polarisation von den Meßbedingungen und der qualitative Zusammenhang zur Oberflächen-Magnetisierung diskutiert werden. Diese methodischen Studien ergänzen die bereits vorhandenen Ergebnisse z.B. von der Fe(110)-Oberfläche [LEU94] und sollen einen Beitrag zur Anregung theoretischer Untersuchungen auf diesem Gebiet leisten.

Der Streuprozess von atomaren Projektilen an Festkörper-Oberflächen wird von einer Vielzahl einzelner Wechselwirkungsprozesse begleitet, die die Bewegung der Projektile und die elektronische Konfiguration des Gesamtsystems beeinflussen [HAG54, THO83]. Eine getrennte Betrachtung der Einzelprozesse ist bisher jedoch nur bedingt möglich. Wie im Abschnitt 5.1 gezeigt wurde, können die Trajektorien der Projektile im Bereich des planaren Channeling gut durch entsprechende Monte-Carlo-Computersimulationen beschrieben werden. Dagegen ist die Entwicklung der elektronischen Konfiguration noch nicht bis ins Detail verstanden und gibt somit Raum für Spekulationen. Für den Zusammenhang der elektronischen Struktur des Festkörpers bzw. seiner Oberfläche als der Ursache für deren magnetische Eigenschaften und der gemessenen Polarisation der angeregten atomaren Zustände ist das Verständnis der elektronischen Wechselwirkung von besonderer Bedeutung. Unter den möglichen elektronischen Austausch- und Anregungs-Prozessen ist für die Interpretation der hier durchgeführten Experimente in erster Linie der Ladungsaustausch zwischen den elektronischen Zuständen der Festkörper-Oberfläche und dem detektierten atomaren Zustand von Interesse.

Die Besetzung eines atomaren Zustandes kann nur dann erfolgen, wenn dieser in Resonanz mit oder energetisch tiefer als ein besetzter Zustand des beteiligten Festkörpers ($E_a \leq E_F$) liegt [THO83]. Betrachtet man das He-Atom vor der Fe(100)-Oberfläche, so erfüllen im ungestörten System ($v_{||}=0$) bei einer Austrittsarbeit von $\Phi_A=4.45\text{eV}$ (siehe Abschnitt 6.5) nur der 1s-Grundzustand des He (Singulett) mit $E_a=-24.59\text{eV}$ und der 2s-Triplett-Zustand mit $E_a=-4.77\text{eV}$ diese Bedingung. Obgleich die gestreuten He^+ -Ionen durch den Elektroneneinfang überwiegend in den Grundzustand neutralisiert werden, konnten deutliche Intensitäten im Fluoreszenzlicht für die Übergänge $\text{HeI } 2s^1\text{S}-3p^1\text{P}$ ($\lambda=494\text{nm}$), $2p^1\text{P}-3d^1\text{D}$ ($\lambda=669\text{nm}$), $2s^3\text{S}-3p^3\text{P}$

($\lambda=389\text{nm}$) und $2p^3P-3d^3D$ ($\lambda=588\text{nm}$) nachgewiesen werden, deren Ausgangszustände deutlich über der Fermi-Energie der Fe(100)-Oberfläche liegen. Folglich ist die Besetzung höherer Zustände (3p, 3d), deren Zerfall (2s-3p, 2p-3d) unter Aussendung des Fluoreszenzlichts beobachtet wird, durch den Streuprozess induziert, wobei sowohl die kinematisch bedingten Änderungen der elektronischen Struktur als auch harte Stöße mit Oberflächen-Atomen an Defekten zum Ladungstransfer beitragen [VWH89]. Im folgenden werden auf die Details des Ladungstransfers aufgrund der Projektilbewegung näher eingegangen und im Zusammenhang mit den Meßwerten Modellansätze zur Beschreibung der resultierenden Polarisation vorgestellt.

Spin-polarisierte atomare Zustände setzen mehrere magnetische Subzustände voraus. Folglich sind Singulett-Zustände nicht spinpolarisiert und die Zirkularpolarisation im Fluoreszenzlicht zeigt unter Umkehrung der Magnetisierungsrichtung des Targets nur für die Triplett-Terme eine entsprechende Änderung. Die Messungen zum Einfang polarisierter Elektronen von Fe(100) und den darauf gewachsenen 3d-Metall-Filmen in dieser Arbeit wurden sämtlich am Übergang HeI $2s^3S-3p^3P$ durchgeführt. Die Fluoreszenzintensitäten sind hier zwar geringer als am Übergang HeI $2p^3P-3d^3D$, die optische Messung wird durch die Lage im ultravioletten Strahlungsbereich aber weniger durch Streulicht beeinflusst.

Zunächst wurden Messungen zur Abhängigkeit der Polarisation des HeI $3p^3P$ -Zustandes von der Parallelgeschwindigkeit der Projektile bei streifendem Einfall ($\Phi_{\text{in}} \approx 1.5^\circ$) durchgeführt. Um eine Mischung des Fluoreszenzlichts von streifend gestreuten Projektilen und solchen Projektilen, die harte Stöße mit Oberflächen-Atomen erfahren haben, weitestgehend zu vermeiden, wurde zunächst eine Abschattungsblende verwendet. Diese begrenzt den Detektionsbereich für das Fluoreszenzlicht im gestreuten Strahl auf den Bereich der Kleinwinkelstreuung und schattet den Detektor gegen das Licht von Projektilen mit großen Streuwinkeln $\Phi_{\text{out}} \gg 2\Phi_{\text{in}}$ ab, was mit einer deutlichen Reduktion der gemessenen Fluoreszenz-Intensität einhergeht. Die Intensitäten sind aber im Bereich der reinen spekularen Streuung so gering, daß die Statistik der entsprechenden Messungen nicht für quantitative Auswertungen genügt. In entsprechenden Vergleichsmessungen stellte sich heraus, daß der Einsatz der Abschattungsblende keine meßbare Änderung der Spin-Polarisation hervorruft, jedoch die Bahn-Polarisation bei Ausblendung der größeren Streuwinkel zunimmt. Zugunsten der besseren Statistik wurde die Abschattungsblende nur so eingesetzt, daß das Target selbst und die unter sehr großen Winkeln $> \text{ca. } 15..20^\circ$ gestreuten Projektile ausgeblendet werden. Dies geht mit einer Reduktion der gemessenen Fluoreszenzintensität auf etwa 50% einher.

Der Vergleich mit den Meßwerten von der Streuung an Fe(110) von J. Leuker [LEU94] zeigt einen qualitativ übereinstimmenden Verlauf der Bahn-Polarisation P_L (Abb. 5-11). Die geringere Bahn-Polarisation in den am Fe(100) durchgeführten Experimenten kann ihre Ursache z.B. im unterschiedlichen Einsatz der Abschattungsblende oder auch in verschiedenen Austrittsarbeiten der untersuchten Oberfläche haben. Die Zunahme der Bahn-Polarisation zu größeren Parallelgeschwindigkeiten (bis zum Erreichen eines Maximalwertes etwa bei der Fermi-Geschwindigkeit der Target-Elektronen, $v_{\text{II}} \approx v_F$) gibt das typische Verhalten für verschiedene Projektil-Target-Kombinationen wieder [WZ88].

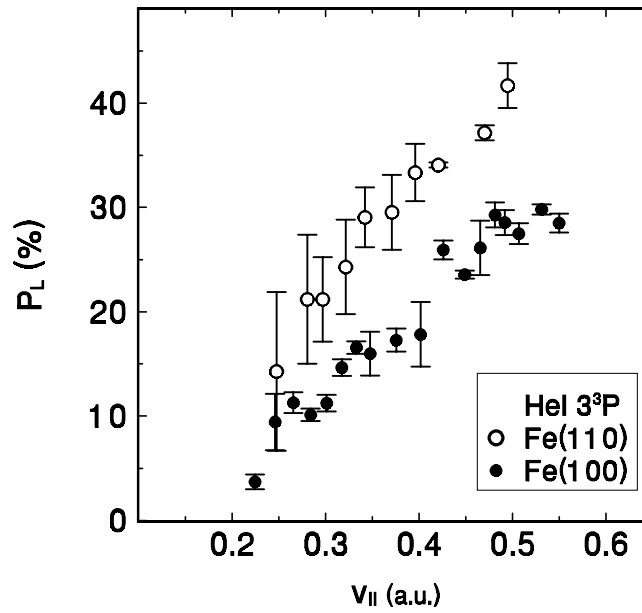


Abb. 5-11 Bahn-Polarisation des $\text{HeI } 3^3\text{P}$ -Zustandes als Funktion der Parallelgeschwindigkeit von He^+ an Fe(100) und Fe(110) [LEU94] unter streifendem Einfall

Unabhängig von der Spin-aufgespaltenen Zustandsdichte der Target-Elektronen ergibt sich die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Bahn-Polarisation aus dem Konzept des kinematisch induzierten resonanten Elektroneneinfangs in den atomaren Zustand. Die einzig notwendige Bedingung für das Auftreten einer Bahn-Polarisation bei nicht senkrechtem Einfall ist der Einfang von Target-Elektronen in den Ausgangszustand des beobachteten atomaren Übergangs. Folglich genügt es, die Struktur der elektronischen Zustandsdichte an der Festkörper-Oberfläche in nullter Näherung durch ein freies Elektronengas zu beschreiben. Betrachtet man nun das System im Ruhezustand des Projektils, so kann die Zustandsdichte mittels der Doppler-Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(k) = \frac{k_F^2 - (k - q)^2}{4kq}$$

modifiziert werden ($q = mv_{||}$). Die auf diese Weise kinematisch induzierte Besetzung von Zuständen oberhalb der Fermi-Energie $E_F = \sqrt{2k_F}$ ist in der Abb. 5-12 für verschiedene Parallelgeschwindigkeiten dargestellt.

Der atomare Zustand des ungestörten Projektils E_a^0 wird aufgrund der Bildladungsverschiebung

$$\Delta E_a = \frac{2Z - 1}{4R}$$

(erste Ordnung Störungstheorie) wegen der einfachen Ladung des Atomrumpfes $Z=1$ mit Verringerung des Abstandes R zur Oberfläche zu höheren Energien verschoben. Im Abstand des Elektroneneinfangs $R_C \approx \langle r_{nl} \rangle + d/2$ [GJ78] ($\langle r_{nl} \rangle$ = mittlere Ausdehnung des atomaren Zustandes, d = Lagenabstand der Oberfläche) muß der atomare Zustand $E_a(R)$ mit besetzten Festkörper-Zuständen in Resonanz sein. Das wird für den $\text{HeI } 3^3\text{P}$ -Zustand mit einer Bindungsenergie von $E_B^0 = -1.58\text{eV}$ zum Vakuum-Niveau ($E_a^0 = E_F + \Phi_A - |E_B^0|$), mit $E_F = 7\text{eV}$ [WF92] und $\Phi_A = 4.45\text{eV}$ (Kap. 6.5) für die

Fe(100)-Oberfläche bei einer Parallelgeschwindigkeit von $v_{||,th}=0.148a.u.$ erreicht (schraffierte Fläche in Abb. 5-12).

Für höhere Parallelgeschwindigkeiten nimmt die Bahn-Polarisation im gestreuten Ensemble bis etwa zur Fermigeschwindigkeit der Targetelektronen zu. Für eine detaillierte Beschreibung oberhalb der Grenzggeschwindigkeit muß neben dem Verhältnis von besetzter und freier Zustandsdichte der Festkörper-Oberfläche in Resonanz mit dem atomaren Zustand auch die Übergangswahrscheinlichkeit W_{kn} zwischen Festkörper- und atomarem Zustand berücksichtigt werden [BZ96]. Hierfür spielt allerdings die Struktur der Zustandsdichte – insbesondere ihre Richtungs- und Spin-Abhängigkeit – eine wichtige Rolle, so daß diese Berechnung zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht möglich ist.

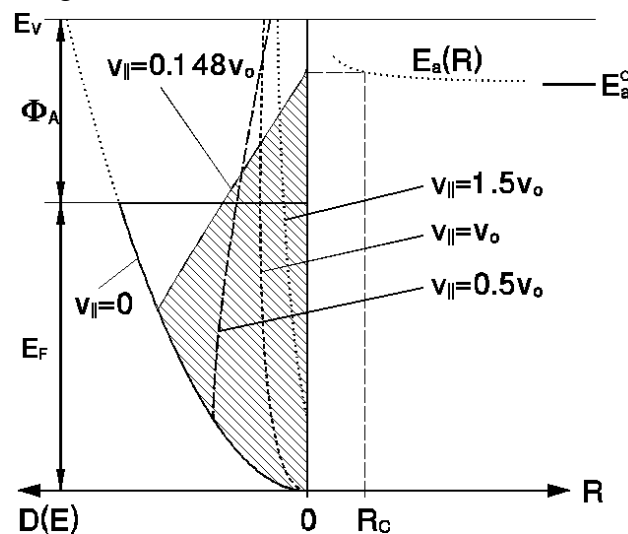


Abb. 5-12 Modell zum resonanten Elektroneneinfang von einem Jellium-Metall bei endlicher Parallel-Geschwindigkeit

Aus dem Modell des freien Elektronengases kann man bereits ohne eine vollständige Rechnung für den Elektroneneinfang qualitative Schlußfolgerungen für die Bahn-Polarisation ziehen:

- Die untere Grenzggeschwindigkeit $v_{||,th}$ für das Auftreten einer Bahn-Polarisation ist an die Bedingung für den kinematisch induzierten Elektroneneinfang in ein im Ruhezustand oberhalb besetzter Festkörperzustände gelegenes atomares Niveau gebunden.
- Bei einer Verschiebung des Fermi-Niveaus bezüglich des Vakuum-Niveaus und damit auch bezüglich des atomaren Niveaus (durch Änderung der Austrittsarbeit) ändert sich die Grenzggeschwindigkeit: $\Phi_A(1) < \Phi_A(2) \rightarrow v_{||,th}(1) < v_{||,th}(2)$. In diesem Fall ist bei einer konstanten Parallelgeschwindigkeit ($v_{||} > v_{||,th}$) unter sonst identischen Streubedingungen auch eine Änderung der Bahn-Polarisation möglich.

Die gemessene Spin-Polarisation des $HeI3^3P$ -Zustandes an der Fe(100)- bzw. der Fe(110)-Oberfläche zeigt eine deutlich unterschiedliche Geschwindigkeitsabhängigkeit (Abb. 5-13). Während die Spin-Polarisation am Fe(110) zu niedrigeren Geschwindigkeiten zunimmt, beobachtet man an der Fe(100)-Oberfläche eine Abnahme von P_S .

Es ist leicht einzusehen, daß ein so unterschiedliches Geschwindigkeits-Verhalten der Spin-Polarisation nicht mehr mit einer idealisierten Bandstruktur des freien

Elektronengases erklärt werden kann. Die Variation der dabei "freien Parameter", wie Fermi-Energie, Austrittsarbeit und Bandaufspaltung zwischen Minoritäts- und Majoritäts-Band ($\Delta_{E\uparrow\downarrow} = E_F^\uparrow - E_F^\downarrow$) beeinflussen die prinzipielle Geschwindigkeitsabhängigkeit nicht wesentlich. Ein zu höheren Energien verschobenes Minoritäts-Band hat in diesem Modell wegen der höheren Zustandsdichte der Majoritätsladungsträger in Resonanz mit dem atomaren Zustand stets eine Zunahme der Spin-Polarisation mit abnehmender Geschwindigkeit zur Folge. Demnach muß man in der Interpretation der Spin-Polarisation über das freie Elektronengas hinausgehen und realistische Bandstrukturen einbeziehen.

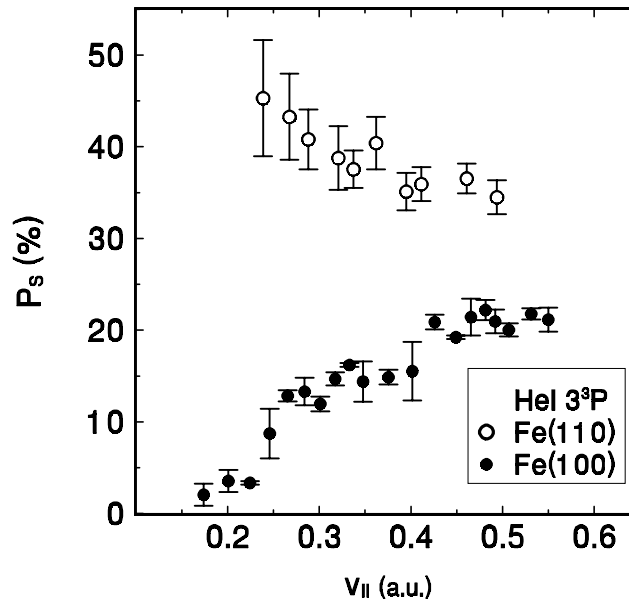


Abb. 5-13 Spin-Polarisation des $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustandes als Funktion der Parallelgeschwindigkeit von He^+ an Fe(100) und Fe(110) [LEU94] unter streifendem Einfall

Da sich nun die Festkörper-Zustände nicht mehr durch ebene Wellenfunktionen beschreiben lassen, kann auch die Galilei-Transformation dieser Zustände in das Ruhesystem des Projektils nicht mehr mittels der Doppler-Fermi-Dirac-Verteilung durchgeführt werden. Für eine adäquate Beschreibung wird hier die geschwindigkeitsabhängige Entwicklung des atomaren Zustandes im Ruhesystem der Festkörper-Oberfläche betrachtet [LOZ97]. In der Abb. 5-14 ist die geschwindigkeitsabhängige Entwicklung des $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustandes veranschaulicht und der Oberflächen-Bandstruktur von Fe(100) [WF92] bzw. Fe(110) [OFC95] gegenübergestellt:

Entsprechend seiner Geschwindigkeit verschiebt sich der atomare Zustand zu höheren Energien: $E_a(v) = E_a + v^2/2$ (durchgezogene Linie). Außerdem wird der Zustand um $\pm k_a v$ mit $k_a = \sqrt{2E_a^*}$ ⁽⁵⁾ verbreitert (gestrichelte Linie für Majoritäts- und gepunktete Linie für Minoritätsladungsträger). Die unterschiedliche Aufspaltung des Zustandes bezüglich Majoritäts- und Minoritäts-Elektronen ergibt sich aus der Bandaufspaltung $\Delta_{E\uparrow\downarrow}$, die hier aus der Verschiebung ähnlicher Strukturen im Majoritäts- (durchgezogene Kurve) und Minoritäts-Band (gestrichelte Kurve) mit $\Delta_{E\uparrow\downarrow}(\text{Fe}(110)) = 2.96\text{eV}$ und $\Delta_{E\uparrow\downarrow}(\text{Fe}(100)) = 2.2\text{eV}$ abgeschätzt wurde. Unter Ver-

⁵ Hier ergibt sich E_a^* für Majoritäts- bzw. Minoritätsladungsträger aus dem Abstand zum Boden des entsprechenden Bandes der Festkörper-Zustände.

nachlässigung der Übergangsmatrixelemente W_{kn} kann jetzt aus dem Überlapp des atomaren Zustandes mit besetzten Festkörper-Zuständen die Spin-Polarisation für den Elektroneneinfang P_S^C näherungsweise mittels

$$P_S^C(v) \propto \frac{\int_{E_{a,min}^{\uparrow}(v)}^{E_F} D^{\uparrow}(E) dE - \int_{E_{a,min}^{\downarrow}(v)}^{E_F} D^{\downarrow}(E) dE}{\int_{E_{a,min}^{\uparrow}(v)}^{E_F} D^{\uparrow}(E) dE + \int_{E_{a,min}^{\downarrow}(v)}^{E_F} D^{\downarrow}(E) dE}$$

bestimmt werden.

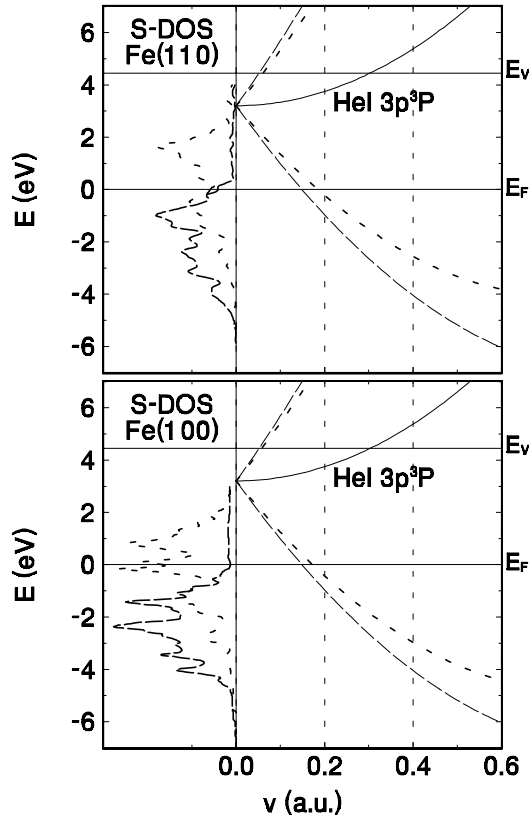


Abb. 5-14 Modell zur Entwicklung des $\text{He}3p^3P$ -Zustandes (energetische Verschiebung und Aufspaltung) mit endlicher Parallelgeschwindigkeit im Abstand y_S des Elektroneneinfangs vor einer Fe(110)- bzw. Fe(100)-Oberfläche (Spin: — up, -- down)

Um auch den Elektronenverlust aus dem besetzten atomaren Zustand in freie Zustände der Festkörper-Oberfläche in gleicher Weise zu berücksichtigen, muß hier wieder unter Vernachlässigung der Übergangsmatrixelemente W_{nk} aufgrund des Überlapps des verbreiterten atomaren Zustandes mit der unbesetzten Zustandsdichte der Oberfläche ($E_F \dots E_V$) die "Polarisation dieser unbesetzten Zustände"

$$P_E = \frac{\int_{E_F}^{E_{a,max}^{\uparrow}(v)} D^{\uparrow}(E) dE - \int_{E_F}^{E_{a,max}^{\downarrow}(v)} D^{\downarrow}(E) dE}{\int_{E_F}^{E_{a,max}^{\uparrow}(v)} D^{\uparrow}(E) dE + \int_{E_F}^{E_{a,max}^{\downarrow}(v)} D^{\downarrow}(E) dE}$$

auf die besetzten atomaren Zustände angewendet werden. Der Elektronenverlust führt also aufgrund der unterschiedlichen verfügbaren unbesetzten Zustandsdichte

für Majoritäts- und Minoritätsladungsträger im Festkörper ebenfalls zu einer Polarisation der atomaren Zustände. In einer einfachen Abschätzung ergibt sich die Spin-Polarisation aus Elektroneneinfang und -verlust P_S^{C+L} demnach zu

$$P_S^{C+L} = P_S^C - \frac{P_E}{|P_E|} (1 - |P_E|) (1 - |P_S^C|).$$

Obwohl diese Beschreibung die Besetzung der magnetischen Subzustände im Projektil entsprechend der Übergangswahrscheinlichkeiten mit der spin- und richtungsabhängigen Zustandsdichte nicht berücksichtigt, wird der jeweilige Trend der gemessenen Spin-Polarisation bei Variation der Projektil-Geschwindigkeit für die Fe(110)- und die Fe(100)-Oberfläche durch die Modellrechnung recht gut wiedergegeben (Abb. 5-15)⁽⁶⁾.

Die Berücksichtigung des Elektronenverlustes bewirkt hauptsächlich eine Änderung in der absoluten Größe der Spin-Polarisation, während der relative Verlauf vom Elektroneneinfang-Kanal geprägt ist. Der berechnete Verlauf der Spin-Polarisation in der Nähe der unteren Grenzggeschwindigkeit für den Elektroneneinfang (vollständige Polarisation bei T=0K) ergibt sich aus der unterschiedlich starken Aufspaltung des atomaren Zustands im angewendeten Modell. Tatsächlich sind die Grenzen für die Zustandsbreite nicht scharf definiert, was den ausschließlichen Einfang von Majoritäts-Elektronen einschränkt.

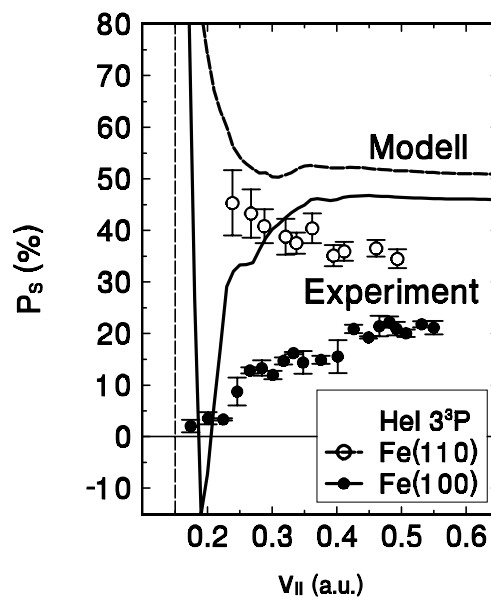


Abb. 5-15 Vergleich von experimentellen Ergebnissen mit der Modellrechnung (siehe Text) für die Geschwindigkeits-Abhängigkeit der Spin-Polarisation des HeI 3^3P -Zustandes bei der streifenden Streuung von He $^+$ an Fe(110) [LEU94] bzw. Fe(100)

Obgleich der prinzipielle Verlauf der Spin-Polarisation mit diesem einfachen Modell erstaunlich gut wiedergegeben wird, mangelt das Modell noch an der deutlichen Abweichung in den Absolutbeträgen. Auch die Rolle des im He $^+$ bereits vorhandenen Elektrons wurde in den bisherigen Betrachtungen gänzlich vernachlässigt. Dennoch untermauert dieses Ergebnis die Notwendigkeit, realistische Bandstrukturen und Übergangswahrscheinlichkeiten in die Bewertung von Polarisationsmessungen

⁶ Im Modell ist bereits eine Korrektur auf die Temperatur bei der Messung (T=300K) einbezogen, die weiter unten in diesem Abschnitt behandelt wird.

mittels Elektroneneinfang in angeregte atomare Terme einzubeziehen.

Schließlich wird aus den vorangegangenen Betrachtungen ersichtlich, daß, sofern man überhaupt von einer Proportionalität zwischen dem magnetischen Moment der Oberfläche und der am $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand gemessenen Spin-Polarisation sprechen kann, diese am wahrscheinlichsten bei Geschwindigkeiten ab etwa 0.5a.u. erreicht wird. Erst bei dieser Parallelgeschwindigkeit ist nahezu die gesamte besetzte Zustandsdichte der Oberfläche in Resonanz mit dem (verbreiterten) atomaren Zustand (Abb. 5-14) und das Verhältnis von "besetztem und unbesetztem" Phasenraum erreicht hier sein Maximum (vgl. Abb. 5-12).⁽⁷⁾

Alle weiteren hier vorgestellten Messungen zum Einfang polarisierter Elektronen in den $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand sind - sofern nicht extra darauf hingewiesen wird - bei einer Primärgeschwindigkeit von $v_0=0.50\text{a.u.}$ durchgeführt (Beschleunigung von He^+ mit einer Primärenergie von 25keV).

Zur Kontrolle der Richtungsabhängigkeit von Spin-Polarisation und magnetischem Moment der Oberfläche wurde die Polarisation unter Variation des azimuthalen Einfallswinkels bestimmt. In der Abb. 5-16 sind die Ergebnisse für zwei verschiedene Parallelgeschwindigkeiten dargestellt.

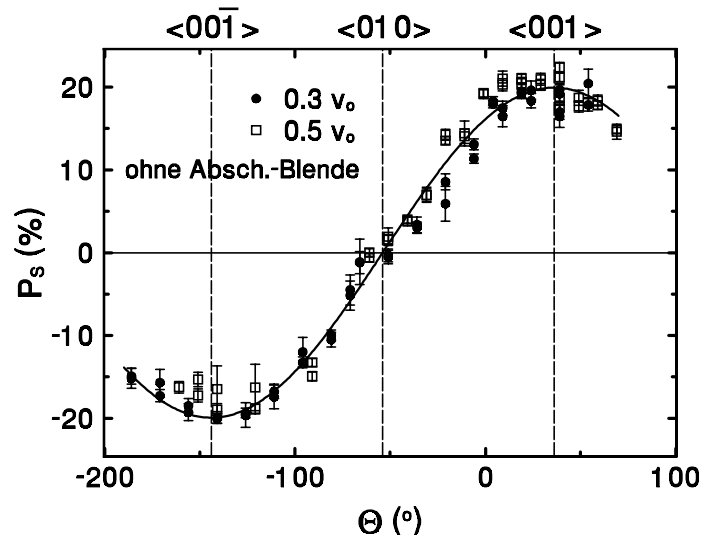


Abb. 5-16 Azimutale Abhängigkeit der Spin-Polarisation bei verschiedenen Parallelgeschwindigkeiten

Zunächst erkennt man, daß die Spin-Polarisation cosinusförmig dem Winkel zwischen Beobachtungsrichtung und Magnetisierungsrichtung vom Magnetjoch folgt (vgl. Abschn. 3.4). Voraussetzung dafür ist die korrekte Ausrichtung des Fe-Kristalls im Magnetjoch, so daß eine leichte Achse (hier $\langle 001 \rangle$) mit der Richtung des äußeren Magnetfeldes zusammenfällt und die Komponente der Magnetisierung in der $\langle 010 \rangle$ -Richtung verschwindet. Die Einhaltung dieser Bedingung wurde durch Aufnahme des Targetstroms als Funktion des azimuthalen Streuwinkels Θ_{in} kontrolliert (vgl. Abb. 5-1). Damit kann man schlußfolgern, daß die gemessene Spin-Polarisation der Projektion des magnetischen Moments der Oberfläche auf die Beobachtungsrichtung folgt. Die gleichzeitig gemessene Bahn-Polarisation wird aufgrund der unveränderten polaren Streugeometrie von der azimuthalen Streurichtung nicht beeinflusst.

⁷ Für nähere Ausführungen zur Proportionalität von gemessener Spin-Polarisation und magnetischem Moment siehe Abschnitt 7.3.1.

Der Fragestellung nach der Proportionalität von magnetischem Moment und Spin-Polarisation kann man in dieser Messung ebenfalls nachgehen. Im Falle einer starken $k_{||}(\Theta)$ -Abhängigkeit der spinabhängigen Bandstruktur und damit auch des Elektroneneinfangs in den angeregten atomaren Zustand (s.o.) sollte dies als Abweichung der Spin-Polarisation vom cosinusartigen Verlauf über der Streurichtung sichtbar werden. Eine solche systematische Abweichung konnte im Rahmen der Meßgenauigkeit weder am Fe(110) [LEU94], noch an der Fe(100)-Oberfläche festgestellt werden.

Es ist anzumerken, daß die dargestellte azimutale Abhängigkeit der Spin-Polarisation (Abb. 5-16) ohne Einsatz der oben erwähnten Abschattungsblende gemessen wurde. Folglich ist von einem nicht unerheblichen Anteil Fluoreszenzlicht auszugehen, das von solchen Projektilen herrührt, die von der Oberfläche nach "harten Stößen" reflektiert wurden. Experimentell konnte das durch schrittweises Verstellen der Abschattungsblende nachgewiesen werden. Unter Zulassung zunehmend größerer Austrittswinkel von gestreuten Projektilen in die Detektion ihres Fluoreszenzlichts steigt die Fluoreszenz-Intensität ab Streuwinkeln von mehreren Grad deutlich an. Werden dagegen alle außerhalb der spekularen Streuverteilung reflektierten Projektilen abgeschattet, so beträgt die Fluoreszenz-Intensität nur noch einige Prozent gegenüber der Detektion aller gestreuten Projektilen. Folglich ist die Besetzung des angeregten atomaren Zustandes bei harten Stößen deutlich effektiver. Damit tritt auch das Konzept des kinematisch induzierten Elektroneneinfangs in den Hintergrund. Die Unterdrückung des kinematischen Effekts wird am Vergleich der azimutalen Abhängigkeit der Spin-Polarisation bei verschiedenen Parallelgeschwindigkeiten deutlich: Während die Spin-Polarisation bei der Abschattung großer Streuwinkel zwischen $v_{||}=0.5a.u.$ und $v_{||}=0.3a.u.$ auf ca. 65% absinkt⁽⁸⁾ (vgl. Abb. 5-13), ist sie hier für beide Parallelgeschwindigkeiten vergleichbar. Die nahezu unveränderte Größe der gemessenen Spin-Polarisation gegenüber dem Ausblenden großer Streuwinkel bei $v_{||}=0.5a.u.$ gestattet außerdem die Ausnutzung der gesamten Fluoreszenz-Intensität unter allen Streuwinkeln, wenn nur die Spin-Polarisation bestimmt werden soll und alle besetzten Festkörper-Zustände einzubeziehen sind.

Noch deutlicher wird die Unabhängigkeit der Spin-Polarisation vom Streuwinkel unter Einbeziehung harter Stöße, indem man auch den Einfallswinkel vergrößert. Die Ergebnisse dieser Messungen sind in der Abb. 5-17 dargestellt. Man beobachtet im gesamten Bereich – vom streifenden bis zum nahezu senkrechten Einfall – innerhalb der experimentellen Unsicherheit eine konstante Spin-Polarisation, unabhängig davon, daß mit zunehmendem Einfallswinkel die Projektilen immer tiefer in den Festkörper eindringen können und die Zahl der zurückgestreuten Projektilen drastisch reduziert wird [OR76]. Da bei harten Stößen mit großen Streuwinkeln die Wechselwirkungszeit in die Größenordnung einer atomaren Einheit kommt, kann man auch hier von einer Verbreiterung des atomaren Zustandes im Bereich mehrerer eV und der Erfüllung der Resonanzbedingung für den Elektroneneinfang aus den besetzten Zuständen der Oberfläche ausgehen [THO83]. Demzufolge ist die Spin-Polarisation offensichtlich von der spezifischen Wechselwirkung unabhängig, solange die

⁸ In der Messung zur Geschwindigkeitsabhängigkeit der Spin-Polarisation in der Abb. 5-13 wurde die Abschattungsblende eingesetzt um das Fluoreszenzlicht von Projektilen nach Großwinkelstreuung auszublenden.

gesamte besetzte Zustandsdichte in den Elektroneneinfang-Prozeß involviert ist.

Die experimentell beobachtete Abnahme der Bahn-Polarisation mit zunehmendem Einfallswinkel ist auf die Symmetrie des Streuprozesses zurückzuführen, und steht in Analogie zu Experimenten, in denen die Anregung atomarer Terme nach Transmission schneller Ionen durch dünne Folien unter Variation des polaren Einfallswinkels studiert wurde [BCE74, WIN83]. Während die Bahn-Polarisation für den senkrechten Einfall ($\Phi_{\text{in}}=90^\circ$) infolge der achsialen Streusymmetrie verschwindet, steigt sie mit abnehmendem Einfallswinkel zur Oberfläche durch die zunehmende Asymmetrie des Streuprozesses an [ELL73].

Konsequenterweise beobachtet man im Regime der streifenden Streuung ($\Phi_{\text{in}} \approx 1..2^\circ$, $v_{\text{II}}=0.5 \text{ a.u.}$) beim Ausblenden großer Streuwinkel mittels der Abschattungsblende eine Zunahme der Bahn-Polarisation bei unveränderter Spin-Polarisation.

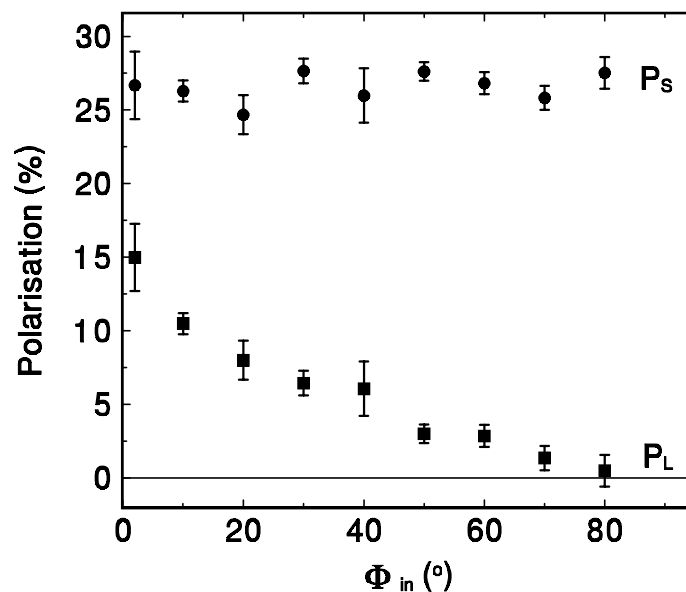


Abb. 5-17 Spin-Polarisation und Bahn-Polarisation des HeI 3^3P -Zustandes als Funktion des Einfallswinkels bei der Streuung an Fe(100) ($E_0=25\text{keV}$)

Die bisherige Betrachtung über den Zusammenhang der gemessenen Spin-Polarisation mit der elektronischen Bandstruktur bezog sich stets auf die Zustandsdichte der Festkörper-Oberfläche, d.h. auf die oberste Atomlage. Ungeachtet der Bedingung für das Überleben des angeregten atomaren Zustandes, daß sich dieser erst auf der auslaufenden Trajektorie in einem Abstand seiner mittleren Ausdehnung $\langle r_{\text{nl}} \rangle$ von der Grenzfläche bilden kann [GJ78], bleibt die Frage bestehen, aus welchem Bereich der Oberfläche die eingefangenen Elektronen kommen. Gleichbedeutend damit besteht die Frage nach einer Zuordnung, ob die angewendete Methode auf die magnetischen Eigenschaften eines oberflächennahen Bereichs, der Oberflächenlage selbst oder gar auf den Bereich vor der obersten Atomlage sensitiv ist.

Zur Abschätzung der Informationstiefe wurde die Temperaturabhängigkeit der Spin-Polarisation studiert, da der Temperaturverlauf des magnetischen Moments von der Dimension der magnetischen Probe abhängt [KGD84, RE86]. Für die Beschreibung des magnetischen Signals in Abhängigkeit von der Informationstiefe genügt zunächst die lagenweise Betrachtung lokalisierter Spinmomente $m=g\mu_B S$, deren mittleres Moment am Gitterplatz i in einer ausgezeichneten Richtung statistisch durch die

Brillouinfunktion wiedergegeben wird [AHA96]:

$$\frac{\langle m_{z,i} \rangle}{m} = B_s \left(\frac{SH_i}{kT} \right)$$

Ohne äußeres Magnetfeld und unter Anwendung der Mean-Field-Näherung reduziert sich das Weiss'sche Molekularfeld H_i auf die Austauschintegrale J_{ij} :

$$H_i = \frac{\langle m_z \rangle}{\tilde{z}_B} \sum_j J_{ij}$$

Wählt man nun bei der Summation über die Gitterplätze j entsprechend dem Heisenberg-Modell ein konstantes Austauschintegral J für die Wechselwirkung nächster Nachbarn und $J=0$ für größere interatomare Abstände, so können für eine spezifische Kristallstruktur die lagenweisen magnetischen Momente $\langle m_{z,n} \rangle$ selbstkonsistent berechnet werden. Die Summation über die Austrittstiefe λ (ML) liefert unter Berücksichtigung einer exponentiellen Abschwächung das Gesamtsignal

$$M_z(\lambda, T) \propto \sum_n \langle m_{z,n} \rangle \exp\left(-\frac{n}{\lambda}\right),$$

wobei für das Signal aus der Oberflächen-Lage ($\lambda=0$) nur $\langle m_{z,0} \rangle$ zu berücksichtigen ist. Der entsprechende Temperaturverlauf für verschiedene Informationstiefen λ an der Fe(100)-Oberfläche (mit $S=1$ [CHI97] für Fe) ist in der Abb. 5-18 zusammen mit den normierten Meßergebnissen der Spin-Polarisation und des transversalen magneto-optischen Kerr-Effekts (MOKE) gezeigt. Während man für das MOKE-Signal aufgrund der großen Signaltiefe von ca. 100ML das typische Verhalten der Volumen-Magnetisierung wiederfindet [CHI97], zeigt die Spin-Polarisation den Signalverlauf einer Empfindlichkeit auf die oberste Atomlage. Dieser über einen relativ weiten Temperaturbereich nahezu lineare Verlauf der Spin-Polarisation ist mit der Methode des Einfangs polarisierter Elektronen bei der streifenden Streuung auch an anderen ferromagnetischen Oberflächen bereits gefunden worden [RE86, LEU94].

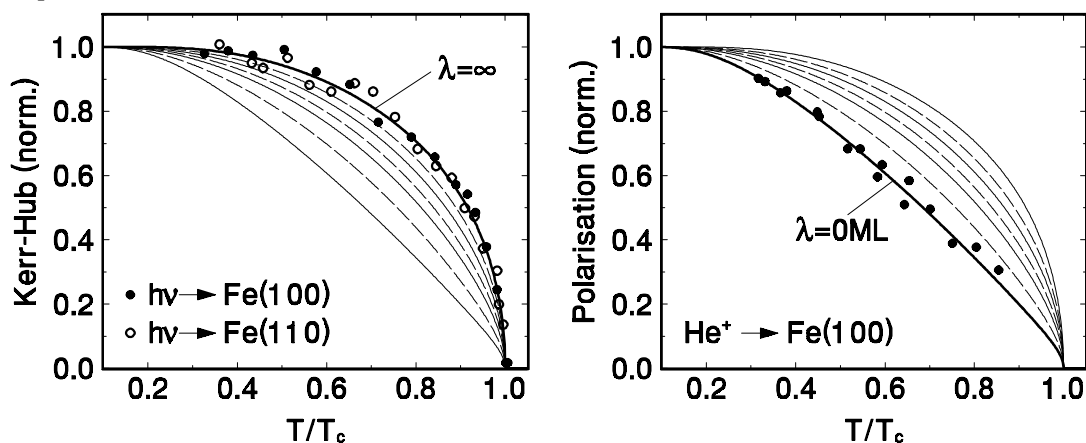


Abb. 5-18 Temperaturabhängigkeit von Kerr-Signal und Spin-Polarisation mit Modellrechnung für verschiedene Austrittstiefen λ (von unten nach oben $\lambda=0, 1, 2, 3, 5, 10$ bzw. ∞ Monolagen; Rechnungen von R. Pfandzelter)

Eine weitere Bestätigung für die extreme Oberflächenempfindlichkeit liefert die Messung der Spin-Polarisation an der mit einer Monolage Mn bedeckten Fe(100)-

Oberfläche unter verschiedenen Einfallswinkeln (vgl. Kap. 7.4). Hier handelt es sich um ein System, bei dem man von einem verschwindenden magnetischen Gesamtmoment in der obersten Atomlage (Mn) und einem dem Volumenwert des Fe vergleichbaren Moment im Substrat unter dem Mn-Film ausgehen kann [WF95, VBD96]. Die während des Wachstums der Monolage Mn deutlich gegenüber der sauberen Fe-Oberfläche reduzierte Spin-Polarisation (ca. 24.5% (Fe) \rightarrow ca. 2.5% (1ML Mn/Fe)) bleibt auch beim steilen Einfall der Projektile unverändert (Abb. 5-19). Folglich kann man auch aus diesem Ergebnis darauf schließen, daß die resonante Besetzung des angeregten atomaren Zustands aus den elektronischen Zuständen der obersten Atomlage erfolgt.

Diese ausgeprägte Empfindlichkeit des Elektroneneinfangs auf die Grenzfläche des Festkörpers zum Vakuum unterstreicht die Bedeutung dieser Methode für die Untersuchung des Oberflächenmagnetismus. Insbesondere bietet sich diese Methode wegen ihrer extremen Oberflächenempfindlichkeit für die Charakterisierung des Magnetismus dünner Filme im Submonolagen- und Monolagenbereich an. Erste Ergebnisse aus der Anwendung auf dünne epitaktische Übergangsmetallfilme auf Fe(100) werden im Kap. 7 vorgestellt.

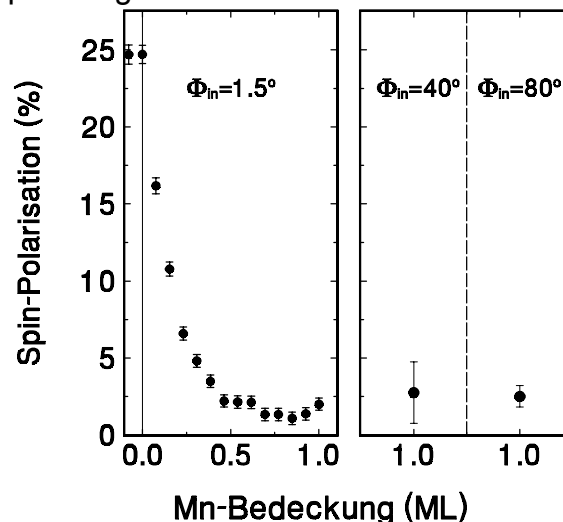


Abb. 5-19 Spin-Polarisation am System Mn/Fe(100) während des Wachstums einer Monolage mit $\Phi_{in}=1.7^\circ$ und anschließender Erhöhung des Einfallswinkels.

6 WACHSTUM VON ÜBERGANGSMETALL-FILMEN AUF Fe(100)

Das Wachstum epitaktischer Filme auf Einkristall-Oberflächen ist Gegenstand zahlreicher Studien der letzten Jahre und hat neben einer Vielzahl von untersuchten Systemen im Bereich der Halbleiter, Metalle, Isolatoren und deren Kombinationen zu einer Reihe neuer Untersuchungsmethoden geführt. Dabei werden neben den direkt abbildenden Rastersonden-Mikroskopien, die zwar Abbildungen der Oberfläche mit atomarer Auflösung erreichen, aber eine Echt-Zeit Beobachtung nahezu unmöglich machen, in der Regel die (periodischen) Änderungen der Oberflächen-Morphologie für die Beobachtung von (lagenweisen) Wachstumsprozessen ausgenutzt [GOM85, NOR88, WAN95, HOE99]. Eine dieser Methoden ist die Beobachtung des Wachstums mittels der streifenden Streuung schneller Ionen, die 1993 zum ersten Mal von Fujii *et al.* [FNK93] zur Beobachtung des homoepitaktischen Wachstums von GaAs(100)-Filmen und 1996 im Rahmenprojekt dieser Arbeit erstmalig auf das heteroepitaktische Wachstum von Cr auf Fe(100) angewandt wurde [IPW96].

In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse aus den Wachstumsmessungen mit der streifenden Ionenstreuung an verschiedenen 3d-Übergangsmetall-Filmen auf Fe(100) im Zusammenhang mit deren Wachstumseigenschaften diskutiert. Zusätzlich zu den rein morphologischen Größen wurde auch die chemische Struktur der heteroepitaktischen Systeme hinsichtlich der Interdiffusionseigenschaften an der Grenzfläche Substrat-Adsorbat mittels Auger-Elektronen-Spektroskopie studiert. Die Kenntnis der Oberflächenstruktur hinsichtlich Morphologie und Zusammensetzung bilden eine wesentliche Voraussetzung für das Verständnis der magnetischen Eigenschaften der epitaktischen Filme.

6.1 Fe(100)-HOMOEPITAXIE

Das homoepitaktische Wachstum von Fe auf Fe(100) ist als ein Modellsystem in der Metall-Epitaxie zu betrachten, das bereits mit anderen Methoden wie der Raster-Tunnel-Mikroskopie (STM) oder der Beugung schneller Elektronen unter streifendem Einfall (RHEED) ausführlich untersucht worden ist [SPD93, SP94]. Diese Studien weisen auf ein nahezu ideales lagenweises Wachstum bei Temperaturen um 600K und ein stationäres Wachstum unter Beteiligung mehrerer offener Lagen bei 300K, wobei sich das Wachstum durch die Bildung von näherungsweise quadratischen Inseln und deren Koaleszenz lagenweise fortsetzt.

Das Szenario des lagenweisen Film-Wachstums auf Einkristall-Oberflächen im Sub-Monolagen-Bereich stellt sich prinzipiell für alle Systeme in gleicher Weise dar: Die aus der Gasphase an der Oberfläche an zufälligen Plätzen adsorbierten Atome diffundieren auf der Oberfläche, bis sie an Terrassenkanten gebunden werden oder andere "freie" Atome treffen, um mit ihnen Wachstumskeime zu bilden. Diese Keime können wieder dissoziieren, sofern sie nicht eine kritische Keimgröße erreicht haben,

oder durch Anlagerung weiterer Adatome stabile Inseln bilden. Solange der mittlere Abstand dieser Inseln kleiner als die mittlere Diffusionslänge der Adatome ist, steigt die Inseldichte deutlich an. Das weitere Wachstum der Monolage wird dann überwiegend durch die Anlagerung neuer Adatome an die Inselränder bestimmt, bis die Inseln schließlich koaleszieren und die Lage aufgefüllt wird. Die Kenngrößen dieser Prozesse, wie z.B. Nukleationsabstand, kritische Inselgröße, Füllungsgrad einer Lage beim Einsetzen der Nukleation in der nächsten Lage oder Diffusionsbarrieren hängen von den äußeren Bedingungen und dem spezifischen System ab.

Da man im homoepitaktischen System von störenden Einflüssen wie der Grenzflächen-Interdiffusion, Gitterfehlانpassung oder Änderungen der elektronischen Struktur absehen kann, eignet sich ein solches System besonders für methodische Studien zur Beobachtung von Wachstumsphänomenen.

Wie bereits in den Abschnitten 2.1.2 und 5.1 diskutiert wurde, ändern sich die Streueigenschaften der streifend einfallenden Ionen/Atome mit der Morphologie der Oberfläche. Die sich während der Ausbildung von Adsorbat-Inseln deutlich erhöhende Stufendichte (sowohl Auf- als auch Abwärts-Stufen entlang der Trajektorie) führt zu einer Bevorzugung größerer Streuwinkel an Aufwärtsstufen sowie einer Streuung in unterspekularen Streuwinkel an Abwärtsstufen (vgl. Abschnitt 5.1) und damit zu einem Verlust in der korrelierten Streuung am planaren Oberflächen-Potential. Es kommt also zu einer Verbreiterung der Streuverteilung durch eine Umverteilung der Streuwinkel. Da insgesamt die Großwinkelstreuung an Defekten begünstigt wird, ist eine zunehmende Defektdichte auch mit einer Abnahme der Gesamtintensität im Bereich der spekularen Streuverteilung verbunden.

In der Abb. 6-1 sind die polaren Streuverteilungen (He^+ , 25keV, $\Phi_{\text{in}}=1.7^\circ$) gezeigt, die während des homoepitaktischen Wachstums von etwa einer Monolage Fe auf der Fe(100)-Oberfläche bei $460\pm 10\text{K}$ aufgenommen wurden. Die Normierung erfolgte dabei auf die Streuverteilung vom unbedeckten Fe(100)-Substrat.

Bereits bei sehr kleinen Bedeckungen der Oberfläche erkennt man eine drastische Abnahme der spekularen Streuintensität. Nachdem die Intensität bei einer Bedeckung von ca. einer halben Monolage ein Minimum erreicht, steigt sie mit zunehmender Füllung der Monolage wieder an. Dennoch wird das Niveau der unbedeckten Substrat-Oberfläche nicht wieder erreicht, was auf eine Abweichung vom idealen Lagenwachstum deutet. Tatsächlich erfolgt bereits deutlich vor Erreichen einer nominellen Bedeckung von einer Monolage eine erneute Nukleation in der zweiten atomaren Lage. Dies ließ sich dadurch bestätigen, daß nach Ausheilen des nominell ca. 1ML dicken Films bei $790\pm 50\text{K}$ (für einige Sekunden) die Streuverteilung identisch der Verteilung an der unbedeckten Substrat-Oberfläche wird (vgl. rechtes Bild in Abb. 6-1). Man kann in diesem Fall davon ausgehen, daß die Struktur des Substrats durch den Film prinzipiell reproduziert worden ist.

Zur Charakterisierung des Wachstums wurden auch hier Monte-Carlo-Computersimulationen der Streuverteilung unter Modifizierung der Oberflächen-Struktur durchgeführt (vgl. Abschnitt 3). Dazu kommt ein einfaches Modell zur Beschreibung des Sub-Monolagen-Wachstums zur Anwendung: Das ausschließlich zweidimensionale und pseudomorphe Wachstum wird durch geometrisch verteilte Inseln mit einem mittleren Abstand L als einzigem freien Parameter beschrieben. Die Inselgröße ergibt

sich dann aus der aktuellen Bedeckung.

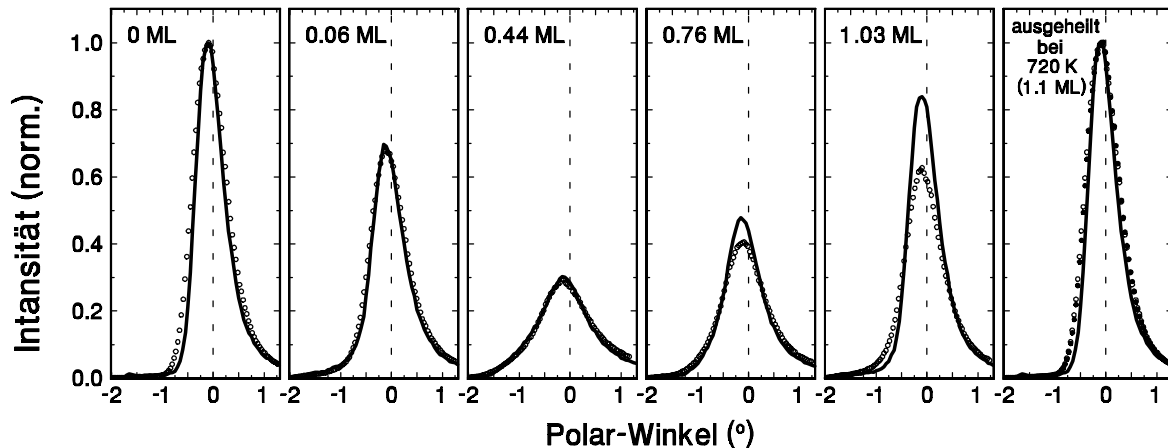


Abb. 6-1 Vergleich von berechneten (Linien) und gemessenen (Symbole) Streuverteilungen beim Wachstum einer ML Cr/Fe(100) und anschließendem Tempern (25keV He⁺ $\Phi_{in}=1.7^\circ$) [PIO99].

Die mit diesem Modell für das ideale lagenweise Wachstum berechneten Streuverteilungen [PFA99] sind in der Abb. 6-1 als durchgezogene Linien eingetragen. Dabei wurde für das Substrat eine mittlere Terrassenbreite von 4000Å und ein mittlerer Inselabstand von $L=90\text{\AA}$ verwendet. Die Anpassung von gemessener und berechneter Streuverteilung ist bis zu einer Bedeckung von etwa einer halben Monolage sehr gut. Erst bei größeren Bedeckungen treten merkliche Abweichungen auf. Dies wird noch deutlicher, wenn man die Intensität im Spekularwinkel und die Halbwertsbreite der gemessenen und berechneten Streuverteilungen als die charakteristischen Parameter über der Bedeckung aufträgt (Abb. 6-2).

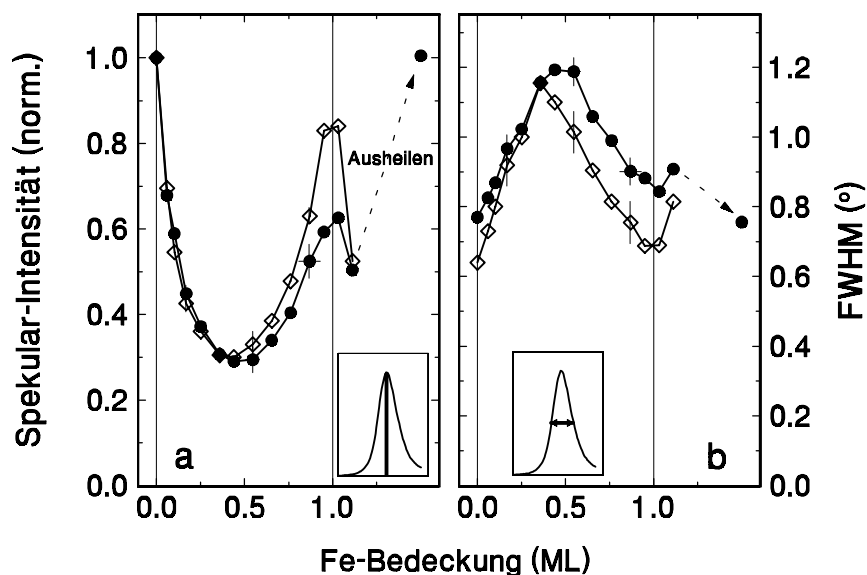


Abb. 6-2 Vergleich von berechneten (offene Symbole) und gemessenen (geschlossene Symbole) Parametern der Streuverteilungen beim Wachstum einer Monolage Cr/Fe(100) und anschließendem Tempern bei ca. 720K (25keV He⁺ $\Phi_{in}=1.7^\circ$) [PIO99].

Sowohl für die spekulare Streuintensität als auch für die Halbwertsbreite wird der prinzipielle Verlauf über der Bedeckung Θ durch die Simulation gut wiedergegeben. Während man für die Halbwertsbreite vorwiegend eine systematische Abweichung zu kleineren Werten feststellt, erkennt man im Intensitätsverlauf bis $\Theta \leq 0.5\text{ML}$ eine

nahezu perfekte Übereinstimmung. Oberhalb $\Theta \approx 0.5 \text{ ML}$ wiederum nimmt die Abweichung zwischen gemessenen und berechneten Größen deutlich zu. Hier spiegelt sich die Diskrepanz zwischen dem verwendeten Wachstumsmodell und dem realen Filmwachstum wider: Während im Modell das Wachstum in mehr als einer atomaren Lage unterdrückt wird, setzt in der Realität im Bereich deutlicher Koaleszenz die Nukleation in der folgenden atomaren Lage ein. Folglich kann man aus dem Vergleich von Experiment und Ideal-Modell den Zeitpunkt des Einsetzens einer Nukleation in der zweiten Lage abschätzen, was z.B. für die Entwicklung verbesserter Wachstumsmodelle mit realistischer Beschreibung der Bedeckung in mehr als einer offenen Film-Lage ausgenutzt werden kann.

Die periodische Änderung der Streuerverteilung und insbesondere der spekularen Streuintensität kann nun zur kontinuierlichen Beobachtung des Schichtwachstums in Echtzeit und *in situ* ausgenutzt werden [PIO99]. Die Variation der Spekular-Intensität ist vorzugsweise auf die Änderung der Stufen-Korrelation (in horizontaler und vertikaler Richtung) zurückzuführen [PFA99]. Die beobachtete Oszillationsperiode entspricht dem Wachstum einer Monolage, sofern die Struktur der Oberfläche von einer zur nächsten Lage reproduziert wird, infolgedessen die Intensität ihr vorheriges Niveau wieder erreicht (stationäres Wachstum). Dies konnte experimentell durch Vergleichsmessungen mit einem Schwingquarz nachgewiesen werden [IGE96].

Ist die Depositionsrates bekannt, so kann bei nicht allzu starker Abweichung vom lagenweisen Wachstum und einer nominellen Bedeckung der Oberfläche mit einer Monolage aus der spekularen Streuintensität abgeschätzt werden, wieviel Material bereits in der zweiten Atomlage vorhanden ist. Im Fall der Messung aus Abb. 6-1 ergibt sich ein Füllungsgrad der ersten Monolage von $(95 \pm 1)\%$.

Die Beobachtung des homoepitaktischen Filmwachstums durch Aufnahme der spekularen Streuintensität streifend gestreuter He^+ -Ionen ($E_0 = 25 \text{ keV}$, $\Phi_{\text{in}} = 1.7^\circ$) mittels fixiertem Detektor im Maximum der Streuerverteilung ist in der Abb. 6-3 exemplarisch für drei verschiedene Substrat-Temperaturen bei gleicher Depositionsrates ($6.5 \times 10^{-3} \text{ MLs}^{-1}$) gezeigt.

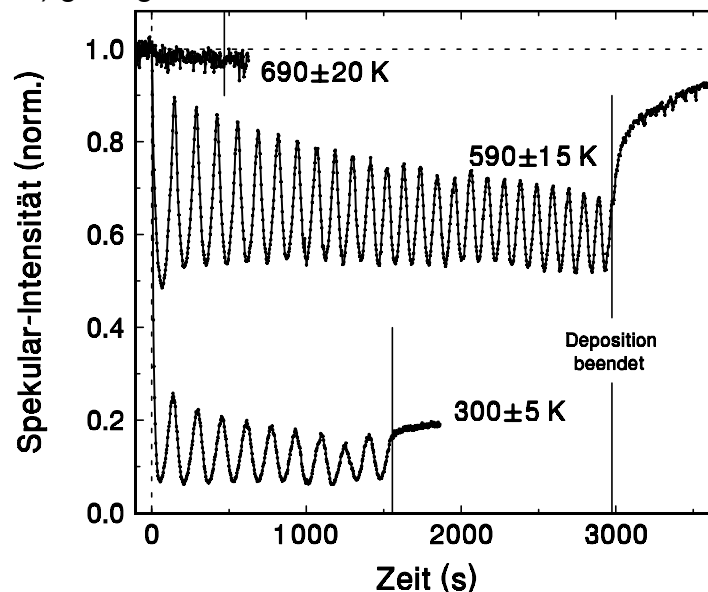


Abb. 6-3 Verlauf der Spekularintensität (25 keV He^+ , $\Phi_{\text{in}} = 1.7^\circ$) beim homoepitaktischen Wachstum von Fe/Fe(100) für verschiedene Substrattemperaturen.

Man erkennt über viele Lagen ausgeprägte Oszillationen bei einer Wachstumstemperatur von $590 \pm 15 \text{ K}$. Die hohe Intensität und scharfe Ausprägung der Maxima kennzeichnen ein nahezu perfektes Wachstum, das sich über Nukleation, Aggregation und Koaleszenz lagenweise fortsetzt. Dennoch nimmt mit zunehmender Bedeckung die Qualität der (quasi) abgeschlossenen Lagen stetig ab, was hier überwiegend auf die Kinetik des Wachstumsprozesses weit entfernt vom thermischen Gleichgewicht zurückzuführen ist. Das wird an der fortgesetzten Umstrukturierung der Filmoberfläche nach Unterbrechung des Aufdampfprozesses zugunsten einer glatteren Oberfläche – gekennzeichnet durch einen beachtlichen Anstieg der Streuintensität – deutlich.

Bei niedrigerer Temperatur bewirkt die Erhöhung der Nukleationsdichte [VPT92] einen stärkeren Abfall der Spekular-Intensität. Die verringerte Interlagen-Mobilität der Adatome, die sich in der fast unveränderten Signalthöhe nach Unterbrechung des Teilchenflusses vom Verdampfer widerspiegelt, resultiert in einer deutlichen Verschlechterung des lagenweisen Filmwachstums.

Eine sichtbar andere Qualität des Filmwachstums von Fe auf Fe(100) findet man bei $690 \pm 20 \text{ K}$: Das sich nur unbedeutend ändernde Streusignal weist darauf hin, daß eine Inselbildung auf den Terrassen des Substrats weitestgehend ausgeschlossen werden kann und das Wachstum über die Aggregation der Adsorbatatome an die Stufenkanten der Substrat-Terrassen ohne wesentliche Änderung der Oberflächen-Struktur fortschreitet. Dieses Regime des "Step-Flow" kann einerseits durch eine im Vergleich zur mittleren Terrassenbreite größere Diffusionslänge der Adatome erreicht werden oder andererseits daraus resultieren, daß selbst größere Wachstumskeime vor dem Erreichen der kritischen Größe wieder zerfallen.

Aus früheren Studien an Sub-Monolagen von Fe auf Fe(100), die bei unterschiedlichen Temperaturen präpariert und – abgekühlt auf Raumtemperatur – mittels Raster-Tunnel-Mikroskopie abgebildet wurden, gibt es Hinweise, daß unterhalb etwa 520 K Dimere von Fe-Atomen bereits stabile Wachstumskeime bilden [STD93, SP94]. Bei höheren Temperaturen treten kleinere Inseldichten mit einer schmalen Größenverteilung auf, was die Autoren mit einer Vergrößerung der kritischen Keimgröße auf vier Atome interpretieren. Um die Nukleations-Eigenschaften ausführlicher zu studieren, wurden mit der streifenden Streuung umfangreiche Studien zum homoepitaktischen Wachstum von Fe auf Fe(100) im Sub-Monolagen-Bereich durchgeführt und aus dem Vergleich der Messungen mit entsprechenden Simulationen bei unterschiedlichen Nukleationsabständen L als Fitparameter die Nukleationsdichte $N=L^{-2}$ ermittelt [PIW00]. In der Abb. 6-4 ist der Vergleich von Experiment und Simulation für unterschiedliche Wachstumsmodi veranschaulicht. Die Inseldichte wird in der Simulation konstant gehalten. Deshalb sind die Abweichungen am deutlichsten einerseits bei den sehr kleinen Bedeckungen, bei denen die reale Inseldichte durch Nukleation noch zunimmt, und andererseits bei Bedeckungen deutlich über einer halben Monolage, bei denen die reale Inseldichte aufgrund der Koaleszenz wieder abnimmt [AFL94]. Weiterhin ist bei nominellen Bedeckungen etwas unterhalb einer Monolage die im Modell nicht integrierte Nukleation in der zweiten atomaren Lage als systematischer Fehler zu berücksichtigen. Folglich ist die (Sättigungs-)Inseldichte im Bereich der Bedeckung mit etwa einer halben Monolage abzuschätzen, bei der die Inseldichte maximal und nahezu konstant ist.

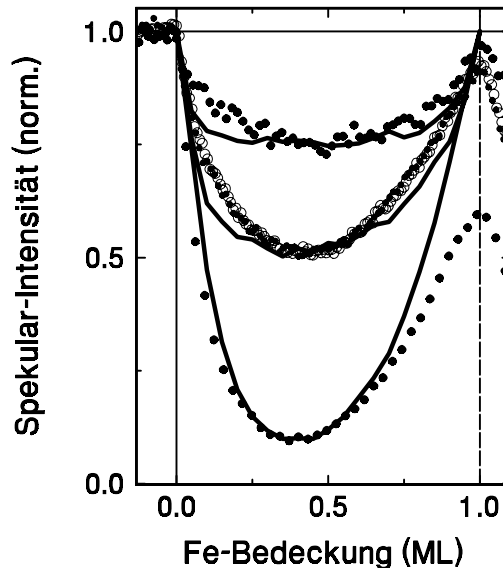


Abb. 6-4 Vergleich von Experiment (Symbole) und Simulation (Linien) der Spekularintensität (25keV He⁺ Φ_{in}=1.7°) beim homoepitaktischen Wachstum von Fe/Fe(100); von oben nach unten: T=590K, F=9×10⁻³ML; T=590K, F=5.8×10⁻²ML; T=420K, F=2.1×10⁻¹ML. Der zweite Datensatz besteht aus zwei Meßreihen und veranschaulicht die gute Reproduzierbarkeit der Experimente. Die Anpassung der Simulation an das Experiment erfolgt über die Wahl des mittleren Inselabstandes im Modell. (Rechnungen: R. Pfandzelter)

In der Nukleationstheorie kann die Inseldichte N für ideales zweidimensionales Wachstum auf isotropen Substraten durch

$$N = \eta \left(\frac{D}{F} \right)^{-i/(i+2)} \exp \left(\frac{E_i / kT}{i+2} \right)$$

beschrieben werden [VEN87]. Der Diffusionskoeffizient $D = 1/4 v_0 \exp(-E_d / kT)$ wird neben der Versuchsfrequenz (Überwindung der Potential-Barriere zwischen benachbarten Gitterplätzen) v_0 vom Verhältnis der Diffusionsbarriere E_d zur thermischen Energie ($\sim kT$) bestimmt. Aus der Variation der Substrat-Temperatur T und der Depositionsrate F ($T \approx 300..640K$, $F \approx 6 \times 10^{-4}..1 \times 10^{-1} \text{MLs}^{-1}$) als die experimentell zugänglichen Einflußgrößen auf die Nukleationsdichte können dann die kritischen Clustergrößen aus $(i+1)$ Adatomen und eine die lateralen Bindungsverhältnisse im Cluster beschreibende Energie E_i ($E_1=0$) abgeschätzt werden. Im Bereich der niedrigen Temperaturen, bei denen bereits Dimere stabile Wachstumskeime bilden ($i=1$), läßt sich die Diffusionsbarriere E_d und mit $\eta=0.2$ [VSH84] auch die Platzwechsel-Versuchsfrequenz v_0 einzelner Atome ermitteln.

In der linken Spalte der Abb. 6-5 sind die spekularen Streuausbeuten bei einigen ausgewählten Temperaturen gezeigt. Deutlich erkennbar variiert die minimale Streuausbeute im Bereich einer halben Monolage abhängig von der Nukleationsdichte N . Die aus diesen Messungen ermittelten Inseldichten sind in der rechten Spalte der Abb. 6-5 über der Depositionsrate aufgetragen und mit den theoretischen Anstiegen entsprechend der kritischen Keimgrößen verglichen ($\ln(N) \sim (i/i+2) \ln(F) + c(T, i)$).⁽⁹⁾

⁹ Da für die Ermittlung der kritischen Keimgrößen nur die relative Zunahme der Inseldichte als Funktion der Depositionsrate zu bestimmen ist, sind die Ergebnisse aus unterschiedlichen Größenverteilungen der Inseln durch entsprechende Ordinaten bei $F=1 \times 10^{-2} \text{MLs}^{-1}$ bzw $F=2 \times 10^{-2} \text{MLs}^{-1}$ an die experimentellen Werte angepaßt.

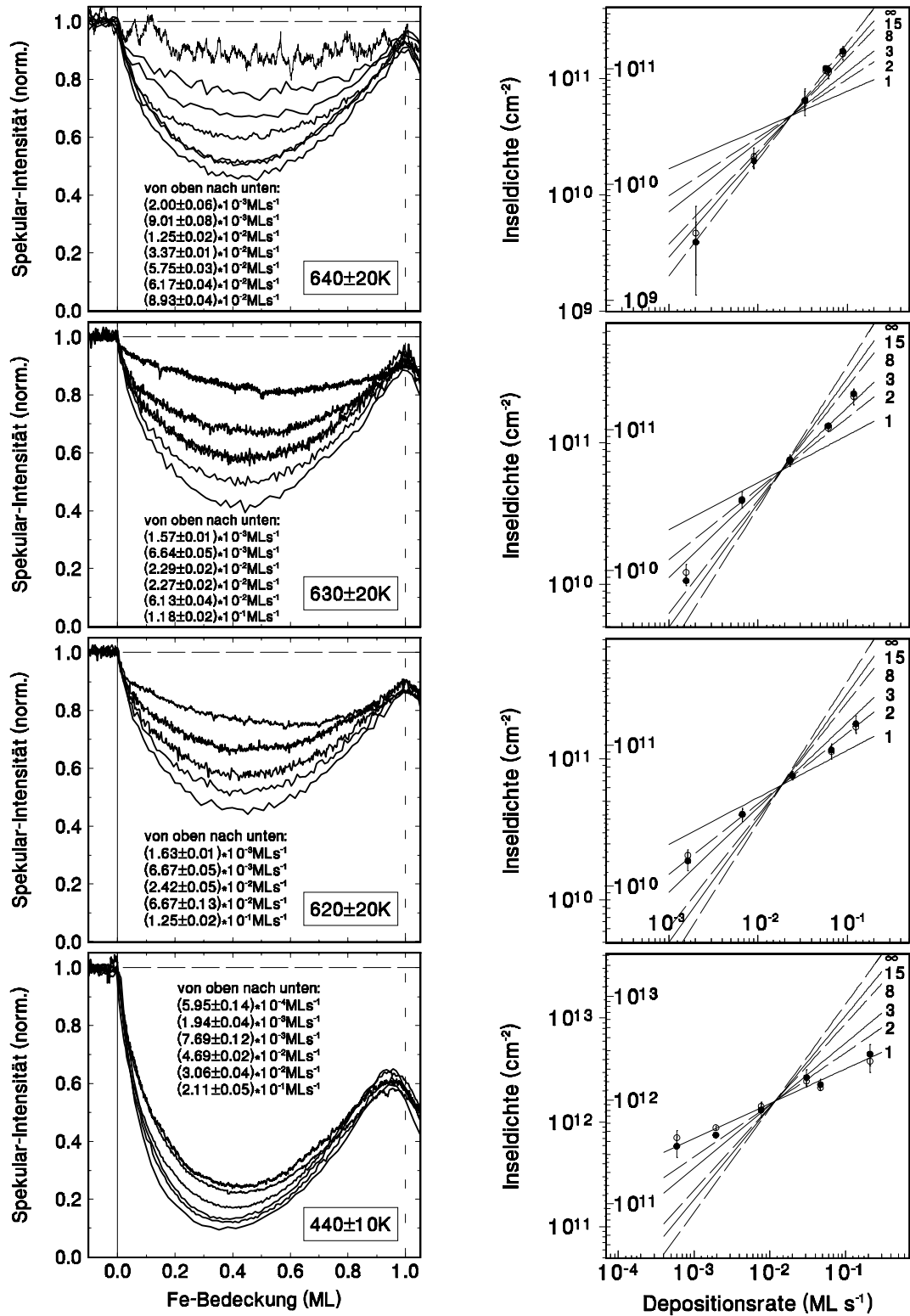


Abb. 6-5 Spekulare Streuausbeute (25keV He⁺ $\Phi_{\text{in}}=1.7^\circ$) beim Wachstum von Fe/Fe(100) für verschiedene Temperaturen und Wachstumsraten (links) zur Ermittlung der Sättigungsinseldichte (rechts), mit deren Hilfe die kritische Keimgröße bestimmt wird. Die theoretischen Anstiege für verschiedene Werte von i ($i+1$ =kritische Keimgröße) sind zum Vergleich eingetragen. Die unterschiedlichen Skalen der Inseldichte ergeben sich aus verschiedenen Modellverteilungen (Γ -Verteilung) der Inselgrößen [PFA99].

Die Unbestimmtheit im Modell ist hier durch die Unsicherheit in der Größenverteilung der Inseln gegeben [ZW91, JW95, PFA99]. Dennoch kann man mit zunehmender

Temperatur eindeutig eine Vergrößerung der kritischen Keimgröße feststellen: Während bei $T=440\pm 10\text{K}$ mit $i=1.0\pm 0.25$ Dimere stabil sind, kann man aufgrund der deutlichen Zunahme von $i=1.93\pm 0.23$ (stabile Trimere) bei $T\approx 620\text{K}$ über $i=3.5\pm 0.5$ bei $T\approx 630\text{K}$ auf Werte um $i=29\pm 9$ bei $T=640\pm 20\text{K}$ innerhalb eines engen Temperaturbereiches prinzipiell nicht mehr von wohldefinierten Regimen mit bestimmten Keimgrößen sprechen.

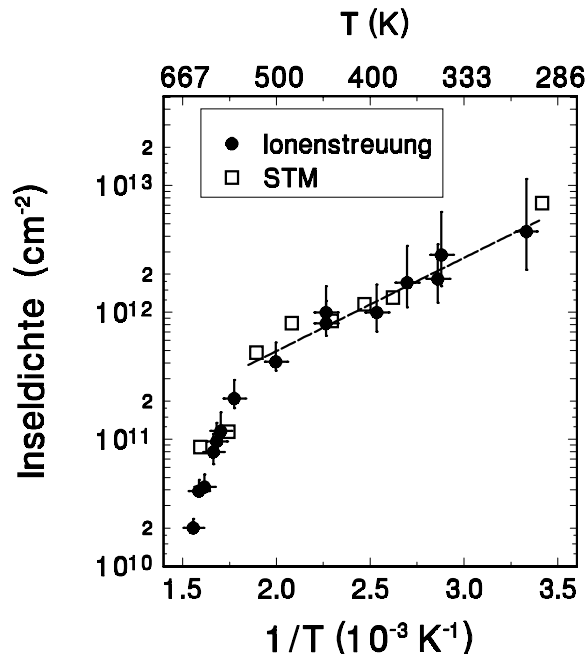


Abb. 6-6 Ergebnisse der temperaturabhängigen Sättigungsinseldichte aus der streifenden Ionenstreuung (siehe Abb. 6-5) im Vergleich mit entsprechenden STM-Daten von Pierce et al. [SPD93] bei einer Depositionsrate von $F=(1.15\pm 0.4)\times 10^{-2}\text{MLs}^{-1}$.

Vielmehr muß man hier davon ausgehen, daß ab einem Übergangsbereich um 630K die Bindungsenergie der Adatome auch in größeren Clustern nicht mehr ausreicht, um stabile Inseln nahezu einheitlicher Größe auszubilden und man die kritische Inselgröße nur noch als einen statistischen Wert für die Dynamik der Inselbildung betrachten kann. Diese Dynamik drückt sich auch in der schon erwähnten Fortsetzung des Oberflächen-Reifeprozesses nach Unterbrechung der Deposition und dem Einsetzen des Step-Flow-Wachstums bei erhöhten Temperaturen aus. So zeigt das langsame Ansteigen der Streuintensität nach Unterbrechung des Teilchenflusses bei $590\pm 15\text{K}$ in der Abb. 6-3 an, daß bei hohen Temperaturen eine erhebliche Umstrukturierung der Oberfläche durch den Zerfall bereits bestehender Inseln (und Terrassen) stattfindet.

In der Abb. 6-6 sind die temperaturabhängigen (Sättigungs-)Inseldichten bei konstanter Depositionsrate ($F=(1.15\pm 0.4)\times 10^{-2}\text{MLs}^{-1}$) gezeigt. Man findet eine sehr gute Übereinstimmung mit den Inseldichten, die bei gleicher Depositionsrate aus STM-Daten von Strosio et al. [SPD93] ermittelt wurden. Der von den Autoren angegebene Wert für die Diffusionsbarriere von $E_d=0.45\text{eV}$ wird hier aus einem linearen Fit an die Inseldichten zwischen 300K und 500K mit $E_d=(0.44\pm 0.05)\text{eV}$ bestätigt. Die Platzwechsel-Versuchsfrequenz der Adatome ergibt sich hier zu $\nu_0=2\times 10^{11\pm 0.7}\text{s}^{-1}$. Weiterhin erkennt man auch an dieser Darstellung den Übergang vom Regime $i=1$ (stabile Dimere) zu größeren kritischen Keimgrößen im Temperaturbereich um 520..540K ($1/T\approx 1.9\times 10^{-3}\text{K}^{-1}$).

Zusammenfassend ist festzustellen, daß die streifende Ionenstreuung eine geeignete Methode zur quantitativen Untersuchung von Wachstumsprozessen in einem weiten Bereich angewandter Temperaturen und Aufdampfzeiten sowohl im Sub-Monolagen-Bereich als auch für das fortgesetzte Lagenwachstum ist. Die Analyse der spekularen Streuintensität auf der Grundlage von Monte-Carlo-Computersimulationen mit Modellen der klassischen Mechanik liefert im Zusammenhang mit der Nukleationstheorie quantitative Ergebnisse relevanter Größen zur Beschreibung des Wachstumsprozesses auf atomarer Skala, die mit den Ergebnissen von STM-Untersuchungen als direkt abbildende Meßmethode gut übereinstimmen. Aufgrund der Beobachtung des Wachstums in Echtzeit und *in situ* ist es sogar möglich, die Dynamik von Wachstum und anschließenden Reifeprozessen über einen großen Bereich von Wachstumsgeschwindigkeiten und -temperaturen zu studieren.

6.2 CR-FILME AUF Fe(100)

Das heteroepitaktische System Cr/Fe(100) hat aufgrund der interessanten magnetischen Eigenschaften der Cr-Filme und des Mehrlagen-Systems Fe/Cr/Fe(100) (Abschnitt 7.2) in den letzten Jahren beträchtlich an Aufmerksamkeit gewonnen. Aufgrund wiederholt aufgetretener Diskrepanzen in experimentellen wie auch theoretischen Studien zu den magnetischen Kopplungseigenschaften zwischen Cr-Film und Fe-Substrat (Abschnitt 7.3) erschien eine detaillierte Untersuchung der Wachstumsphänomene in diesem System als mögliche Ursache für die unterschiedlichen Ergebnisse unausweichlich. Dabei stellte sich heraus, daß es im Gegensatz zu homoepitaktischen Systemen nicht ausreicht, nur die morphologische Struktur des Films zu betrachten, sondern auch Interdiffusionsprozesse an der Grenzfläche zum Substrat berücksichtigt werden müssen [PIW96, VH96, HCM00]. Unter Einbeziehung sowohl der morphologischen als auch der chemischen Struktur der Grenzfläche sind zahlreiche Meßergebnisse zu den magnetischen Eigenschaften des Systems Cr/Fe(100) erneut zu diskutieren [z.B. TWF98].

In den folgenden Abschnitten sind die Ergebnisse zum Wachstum von Cr-Filmen auf Fe(100) aus den Untersuchungen mit der streifenden Ionenstreuung dargestellt [IPW96, PIW96, PIW97b, PIW97c].

6.2.1 MORPHOLOGISCHE STRUKTUR DER CR-FILME

Wie im Abschnitt 6.1 ausführlich dargestellt wurde, können aus der Beobachtung der spekularen Streuausbeute beim epitaktischen Filmwachstum wesentliche strukturelle und dynamische Größen zur Beschreibung des Wachstumsprozesses gewonnen werden. Neben der qualitativen Veranschaulichung des Wachstumsmodus von mehrlagigen Filmen gewinnt man aus dem Vergleich mit Simulationsrechnungen insbesondere für das anfängliche Wachstum im Sub-Monolagen-Bereich Aussagen zu mittleren Inselabständen, zur Diffusionsbarriere bei der Adatom-Diffusion sowie in einigen Fällen zum Reifeprozess und zum Füllungsgrad der atomaren Lagen.

Zur Überprüfung der geometrischen Anordnung der Cr-Atome in dem aufgewachsenen Film wurde zunächst die Fokussierung beim achsialen Channeling ausgenutzt (vgl. Abschnitt 5.1.1). Dazu wurde an der sauberen Fe(100)-Oberfläche

und einem darauf aufgewachsenen Cr-Film ($\Theta=1\text{ML}$) die spekulare Streuausbeute unter Variation des azimutalen Einfallswinkels θ im Bereich des $\langle 001 \rangle$ -Kanals aufgenommen (Abb. 6-7). Sowohl für die saubere als auch die mit einer Monolage bedeckte Fe(100)-Oberfläche findet man den gleichen Verlauf der spekularen Streuausbeute beim Übergang vom planaren zum achsialen Channeling mit übereinstimmender Richtung der Fokussierung im $\langle 001 \rangle$ -Kanal. Dies zeugt vom pseudomorphen Wachstum des Cr-Films, wie es aus der übereinstimmenden bcc-Struktur von Fe und Cr mit vergleichbaren Gitterkonstanten ($a_{\text{Fe}}=2.866\text{\AA}$, $a_{\text{Cr}}=2.885\text{\AA}$) zu erwarten ist.

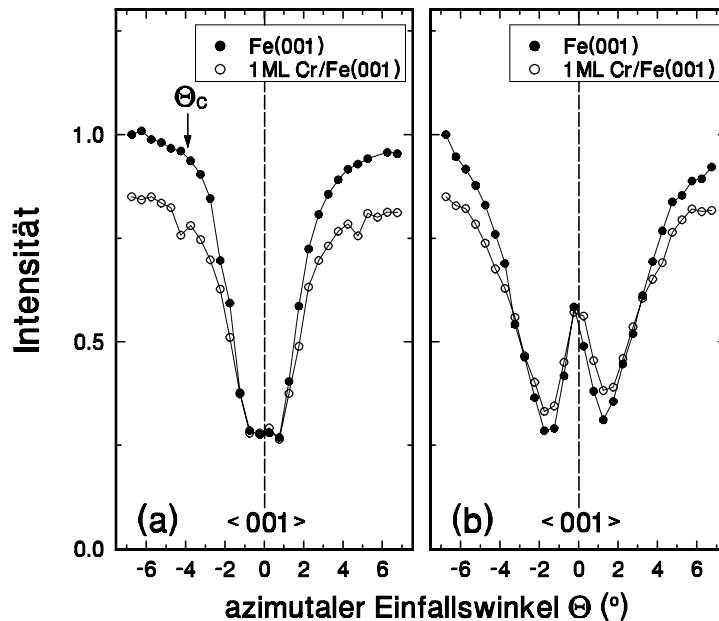


Abb. 6-7 Vergleich der spekularen Streuausbeute bei der Streuung von 25keV H^+ an Fe(100) und 1ML Cr/Fe(100) unter azimuthaler Drehung des Targets für (a) $\Phi_{\text{in}}=1.03^\circ$ bzw. (b) $\Phi_{\text{in}}=2.09^\circ$.

Der Wachstumsmodus der Cr-Filme wurde analog zur Fe/Fe(100)-Homoepitaxie durch die kontinuierliche Aufnahme der spekularen Streuausbeute im Bereich des planaren Channeling (ca. 6° neben dem $\langle 001 \rangle$ -Kanal) beobachtet. Die für das (quasi) lagenweise Wachstum typischen Oszillationen sind für eine Depositionsrates von $F=(1.68\pm 0.14)\times 10^{-3}\text{ MLs}^{-1}$ in der Abb. 6-8 dargestellt. Auch hier findet man für Temperaturen um 400K ein transientes lagenweises Wachstum der Cr-Filme. Die deutliche Abnahme der Streuintensität zu Beginn des Wachstums ist auf eine hohe Nukleationsdichte zurückzuführen. Die stetige Abnahme der Intensitätsmaxima zeigt, daß die Qualität der Filmoberfläche mit jeder weiteren Lage abnimmt, was mit einer Zunahme der Oberflächenrauigkeit durch gleichzeitiges Wachstum in mehreren Lagen zu erklären ist.

Bei ca. 620K deutet die über mehrere Lagen hohe Streuausbeute auf ein deutlich besseres Lagenwachstum des Cr-Films. Während hier im Bereich der ersten Monolage die Regime der Nukleation, Aggregation und Koaleszenz noch vergleichsweise deutlich zu trennen sind, gehen diese Prozesse in den folgenden Lagen ineinander über. Folglich tritt hier die gleichzeitige Beteiligung mehrerer Lagen am Wachstumsprozeß in den Vordergrund. Die nur noch schwach ausgeprägten Oszillationen sind vergleichbar mit dem Step-Flow-Regime beim idealen Wachstum der Fe-

Filme (vgl. Abb. 6-3), wobei sich das Wachstum hier vorrangig von den bereits gewachsenen Inseln fortsetzt, was effektiv einer verringerten mittleren Terrassenbreite entspricht.

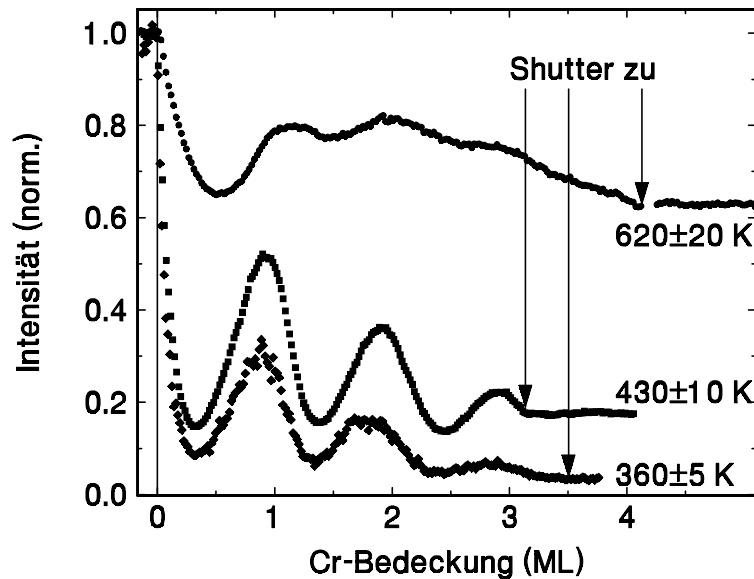


Abb. 6-8 Spekulare Streuausbeute (25keV He⁺ $\Phi_{in}=1.7^\circ$) beim Wachstum von Cr/Fe(100)

Dennoch ist die Qualität der Cr-Filme bei gleicher Wachstumstemperatur nicht so gut wie die der Fe-Filme. Das wird durch den Vergleich mit dem Verlauf der spekularen Streuausbeute beim homoepitaktischen Wachstums von Fe/Fe(100) (im Bereich der ersten Monolage) bei vergleichbarer Depositionsrate deutlich (Abb. 6-9). Am Cr-Film zeigt sich anhand der Minima eine höhere Nukleationsdichte und anhand der niedrigeren Maxima bei nomineller Bedeckung von ca. einer Monolage die nicht so vollständige Füllung der Lage. Dieses Verhalten kann primär der höheren Diffusionsbarriere im System Cr/Fe(100) von $E_{d,Cr/Fe(100)}=0.9\pm0.2\text{eV}$ [IGE96] gegenüber $E_{d,Fe/Fe(100)}=0.45\text{eV}$ für Fe/Fe(100) zugeschrieben werden.

Aus dem Vergleich mit den Simulationsrechnungen [PIW97b] erhält man für die Cr-Filme in der Abb. 6-8 ($F\approx1.7\times10^{-3}\text{MLs}^{-1}$) Nukleationsabstände von $L\approx30\text{\AA}$ bei $T\approx360\text{K}$, $L\approx50\text{\AA}$ bei $T\approx430\text{K}$ und $L\approx400\text{\AA}$ bei $T\approx620\text{K}$. Diese Werte sind stehen in guter Übereinstimmung mit STM-Aufnahmen [PSU94, DSP96], bei denen ähnliche Parameter für das Wachstum von Cr auf Fe(100)-Whiskern verwendet wurden.

Eine zuverlässige Abschätzung für den Füllungsgrad der atomaren Lage bei einer nominellen Bedeckung von einer Monolage aus der spekularen Streuintensität ist besonders bei entsprechend niedrigen Intensitäten schwierig. Dies ist dadurch begründet, daß kleine "Löcher" entlang der Trajektorie deutlich weniger als bereits entstandene Inseln gleicher Größe auf dieser Lage zur Abnahme der spekularen Streuausbeute beitragen, da der Sprung im exponentiellen Oberflächenpotential an einer Aufwärtsstufe deutlich größer als an einer Abwärtsstufe ist.⁽¹⁰⁾ Eindrucksvoll wird dieses Verhalten durch die Verschiebung des Minimums zu kleineren

¹⁰ Man kann sich den Grad der Beeinflussung von "Loch" und "Insel" mit vergleichbar geringer Ausdehnung gegenüber der effektiven Wechselwirkungslänge zwischen Projektil und Oberfläche anschaulich klarmachen, indem man den effektiven Wirkungsquerschnitt der Folge Abwärtsstufe-Aufwärtsstufe mit dem umgekehrten Fall vergleicht. Im Falle des "Loches" wird die Aufwärtsstufe nur für ausgewählte Trajektorien wirksam und der Einfluß nimmt mit verringerter Ausdehnung des "Loches" ab.

Bedeckungen bei Zunahme der Nukleationsdichte und der damit verbundenen Zunahme solcher "Löcher" im Bereich der Koaleszenz wiedergegeben. Da die Nukleationsdichte den Füllungsgrad der Monolage im Bereich der angewendeten Depositionsraten nur unwesentlich beeinflusst (vgl. linke Spalte von Abb. 6-5), kann im günstigen Fall einer starken Intensitätsabnahme (hohe Nukleationsdichte und Step-Flow vernachlässigbar) zu Beginn des Filmwachstums aus der Intensitätshöhe bei $\Theta=1\text{ML}$ die Bedeckung in der zweiten Lage abgeschätzt werden. Diese Abschätzung ist wegen der Vernachlässigung der Löcher im Film als eine Obergrenze für die Bedeckung auf der ersten Lage zu betrachten. Bei dieser konservativen Abschätzung ergibt sich für die Cr-Monolage bei $T\approx 360\text{K}$ ein Füllungsgrad von $88\pm 2\%$ und bei $T\approx 430\text{K}$ von $91\pm 2\%$ (Abb. 6-8).

Schwieriger wird eine derartige Abschätzung bei erhöhten Temperaturen, da hier in zunehmendem Maße mit dem Wachstum durch Aggregation an Terrassenkanten des Substrats (Step-Flow) zu rechnen ist, wobei die Struktur der Oberfläche quasi erhalten bleibt. Davon zeugt auch der in der Messung bei hohen Temperaturen stets geringere Abfall der Streuintensität gegenüber der Simulation mit reinem "Inselwachstum" [PIW97b] (vgl. Abb. 6-4). Da man von einer vollständigen Füllung der Monolage ohne Nukleation in der nächsten Lage nur ausgehen kann, wenn das Ausgangsniveau bei der Streuung an der unbedeckten Substrat-Oberfläche wieder erreicht wird (vgl. Abb. 6-5), ist aus dem Vergleich mit der Messung bei $T\approx 430\text{K}$ davon auszugehen, daß der Füllungsgrad der Cr-Monolage für die Hochtemperaturmessung in der Abb. 6-8 ($T\approx 620\text{K}$) etwa 95% beträgt.

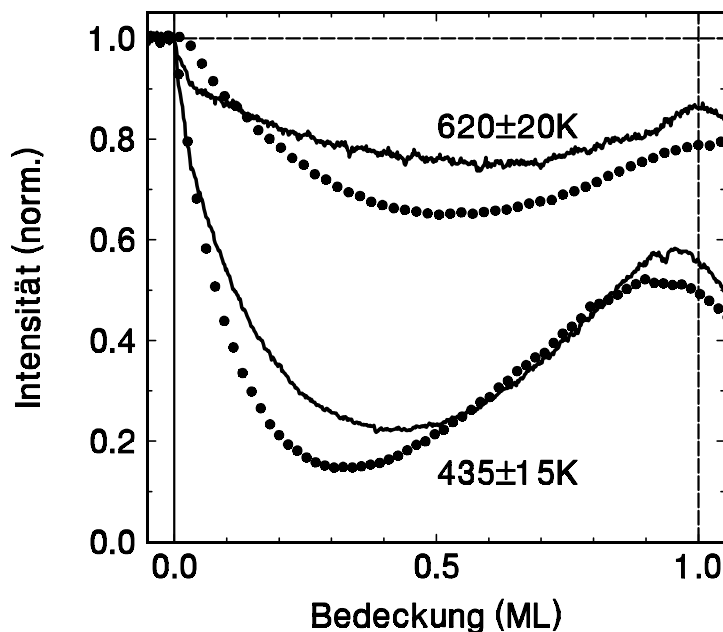


Abb. 6-9 Vergleich der spekularen Streuausbeute ($25\text{keV He}^+ \Phi_{\text{in}}=1.7^\circ$) beim Wachstum von Cr/Fe(100) (Symbole) und Fe/Fe(100) (Linien) bei gleicher Wachstumsrate.

Zusammenfassend kann man feststellen, daß die Cr-Filme auf Fe(100) aus morphologischer Sicht epitaktisch und nahezu lagenweise wachsen. Während die Filme bei ca. 620K über mehrere Monolagen sehr glatt aufwachsen, findet man mit abnehmender Temperatur einen Übergang zum transient lagenweisen Wachstum, bei dem sich das Wachstum mit zunehmender Filmdicke in mehreren Lagen gleichzeitig fortsetzt.

6.2.2 CHEMISCHE STRUKTUR DÜNNER CR-FILME AUF Fe(100)

Die chemische Struktur lagenweise gewachsener ultradünner Cr-Filme auf Fe(100) wurde mittels der Auger-Elektronen-Spektroskopie studiert. Wie bereits im Abschnitt 2.3 erwähnt, wird die Auflösung des Konzentrationsprofils durch die Analyse von Auger-Linien einerseits aus der Anregung mit 4keV-Primär-Elektronen verschiedener Energien ($M_{23}VV$, L_3VV) und damit auch unterschiedlicher Signaltiefen [FG92] sowie aus der Anregung mit streifend gestreuten 25keV-Protonen ($M_{23}VV$) mit Sensitivität auf die oberste Atomlage erreicht [PL93].

In der Abb. 6-10 sind zunächst die Elektronen- und Protonen-induzierten Auger-Spektren $N(E)$ im Bereich der $M_{23}VV$ -Linie von Cr und Fe für das saubere Fe(100)-Substrat und bei ca. 600K gewachsene Cr-Filme ($\Theta=1ML$ bzw. $\Theta=4ML$) gezeigt. Das Protonen-induzierte Signal der Fe-Linie ist bei der Bedeckung mit einer Monolage Cr gegenüber dem unbedeckten Substrat zwar erheblich verringert, aber immer noch deutlich sichtbar. Auch die Cr-Linie hat noch nicht ihre endgültige Höhe erreicht. Erst bei größeren Bedeckungen (hier 4ML) findet man das typische Spektrum einer reinen Cr-Oberfläche. Da bei gut ausgeprägtem Lagenwachstum ohne Interdiffusion das Protonen-induzierte Auger-Spektrum aufgrund seiner Empfindlichkeit auf die oberste Atomlage von einem morphologisch glatten Film bereits ab einer Bedeckung mit einer Monolage nur noch das konstante Signal des Adsorbats zeigt [PL93], wird bereits hier die Grenzflächen-Interdiffusion von Cr und Fe deutlich. Auch die Beschränkung der Interdiffusion auf die Lagen in unmittelbarer Nähe zur Grenzfläche Cr/Fe ist aus dem verschwundenen Fe-Signal im Protonen-induzierten Spektrum von 4ML Cr/Fe abzulesen.

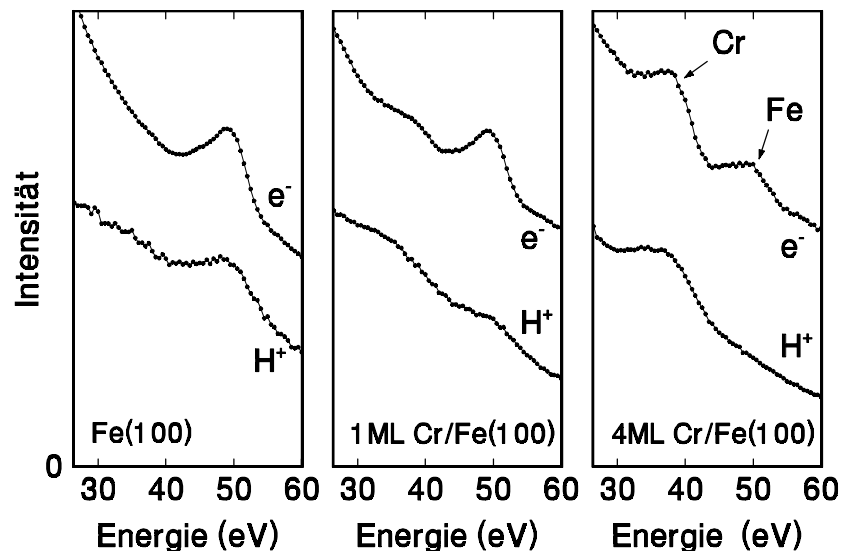


Abb. 6-10 Vergleich der $M_{23}VV$ -Auger-Spektren $N(E)$ für Fe(100) und Cr/Fe(100) nach Anregung mit 4keV Elektronen ($\Phi_{in} \sim 33^\circ$) und 25keV Protonen ($\Phi_{in} \sim 1.5^\circ$).

Für das Elektronen-induzierte Signal der $M_{23}VV$ -Linie fällt die Änderung der Signalhöhen aufgrund der größeren Signaltiefe deutlich schwächer aus. Die Ermittlung eines quantitativen Konzentrationsprofils aus den Auger-Spektren erfordert hier die genaue Kenntnis der Signaltiefe. Dafür wurde das Wachstum über mehrere Lagen kontinuierlich durch die gleichzeitige Aufnahme von Elektronen-induziertem Auger-Signal und spekularer Streuausbeute von 25keV-He⁺-Ionen

beobachtet, so daß man einerseits eine sichere Zuordnung des Auger-Signals zur Filmdicke und andererseits den Signalverlauf im Bereich sauberer Cr-Lagen ($\Theta > 3\text{ML}$) erhält [IGE96]. Die typische Abnahme der Elektronen-induzierten Fe- $M_{23}VV$ -Linie ($E=47\text{eV}$, peak-to-peak Höhe nach numerischer Differentiation des $N(E)$ -Spektrums) beim lagenweisen Wachstum von Cr auf Fe(100) ist in der Abb. 6-11 wiedergegeben. Das entsprechende Cr-Signal bei $E=41\text{eV}$ ist aufgrund der Grenzflächeninterdiffusion zunächst kaum zu detektieren, zeigt jedoch oberhalb etwa einer Monolage Cr-Bedeckung einen deutlichen Anstieg und konvergiert bald gegen einen konstanten Wert. Im Bereich eines quasi reinen und stationären Cr-Wachstums (oberhalb $\Theta=2\text{ML}$) kann bei einer exponentiell mit der Tiefe abfallenden Austrittswahrscheinlichkeit für die Auger-Elektronen aus den Fe-Auger-Signalen durch Vergleich der Signalthöhen aufeinanderfolgender Lagen unter der Voraussetzung eines konstanten Anregungsquerschnitts bis in das Fe-Substrat die Signaltiefe bestimmt werden [IPW98]. Die Auswertung mehrerer Meßreihen ergab für die Fe- $M_{23}VV$ -Linie bei $E=47\text{eV}$ eine Signaltiefe von $\lambda=2.2\pm0.2\text{ML}$. Eine entsprechende Analyse der Fe- L_3VV -Linie bei $E=703\text{eV}$ liefert eine Austrittstiefe von $\lambda=5.9\pm0.4\text{ML}$.

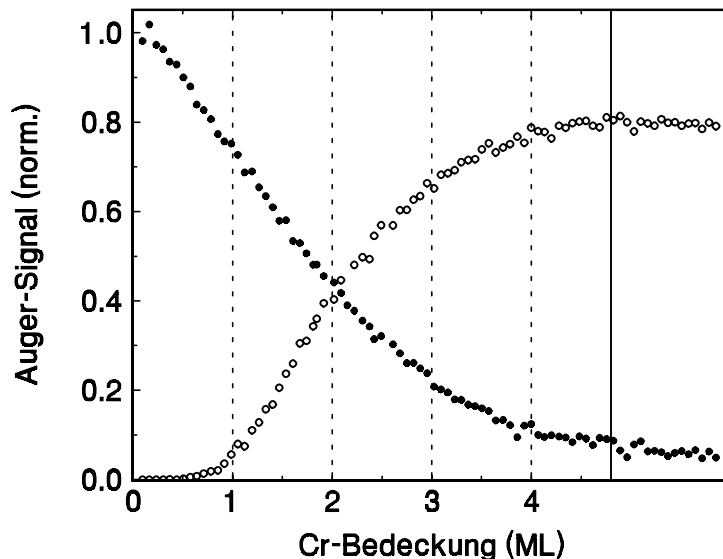


Abb. 6-11 Normiertes Auger-Signal von Fe und Cr beim Wachstum von Cr/Fe(100) bei $T \approx 600\text{K}$ (peak-to-peak-Höhe der $M_{23}VV$ -Linien im numerisch abgeleiteten Spektrum $dN(E)/dE$) nach Anregung mit 4keV Elektronen. Bei $\Theta_{\text{Cr}}=4.7\text{ML}$ wurde das Wachstum unterbrochen (durchgezogene Linie).

Unter Berücksichtigung der Detektionsgeometrie stehen diese Werte in guter Übereinstimmung mit theoretisch berechneten mittleren freien Weglängen inelastisch gestreuter Elektronen bei diesen Energien von $\lambda=2.7$ bzw. 6.1ML [TPP91, NTT80].

Die unterschiedlich starke Abnahme der Auger-Signale aufgrund der verschiedenen Signaltiefen ist für das Wachstum der ersten beiden Monolagen Cr auf Fe(100) bei $T=600\pm30\text{K}$ in der Abb. 6-12 deutlich sichtbar. Aus dem Protonen-induzierten Auger-Signal kann man wegen der Anregung nur in der Oberflächenlage direkt auf die aktuelle Fe-Konzentration in der Film-Oberfläche schließen. Um auch die Cr-Konzentration in den tieferen Lagen zu ermitteln, wurde diese bei der Berechnung der theoretischen Signalthöhe innerhalb der oberen fünf Lagen kontinuierlich variiert. Aus dem Vergleich mit den experimentellen Werten bei $\Theta=1\text{ML}$ bzw. $\Theta=2\text{ML}$ erhält

man das Konzentrationsprofil in den oberflächennahen Lagen. Danach ergibt sich für den 1ML-Cr-Film in der obersten Lage ein Cr-Anteil von $45\pm 3\%$. In der ersten Lage unter der Oberfläche (oberste Substratlage) befinden sich $55\pm 5\%$ Cr und in die zweite Lage unter der Oberfläche ist quasi kein Cr diffundiert ($0\pm 10\%$)⁽¹¹⁾. Dieses Ergebnis zeigt, daß der Austausch von Cr-Atomen hier überwiegend nur mit Fe-Atomen der obersten Substratlage erfolgt und tiefere Schichten an der Interdiffusion nicht beteiligt sind. Beim Wachstum der zweiten Lage kann der Austausch von deponierten Cr-Atomen nur noch mit deutlich weniger Fe-Atomen an der Oberfläche stattfinden, was zu einer weiteren Verringerung der Fe-Konzentration mit zunehmender Filmdicke führt. So findet man bei $\Theta=2\text{ML}$ aus den Signalhöhen eine Verteilung des Cr auf die obersten drei Atomlagen mit $70\pm 5\%$ in der Oberflächenlage, $92\pm 8\%$ in der ersten und $30\pm 25\%$ in der zweiten Lage unter der Oberfläche.

Mit zunehmender Filmdicke verschwindet der Anteil von Fe an der Oberfläche. Das Auger-Signal der Fe-Linie im Protonen-induzierten Auger-Signal beträgt bei $\Theta=3\text{ML}$ noch $12.5\pm 3\%$ und ist bei $\Theta=4\text{ML}$ mit $5\pm 3\%$ bzw. bei $\Theta=5\text{ML}$ mit $3\pm 3\%$ kaum noch auszumachen⁽¹²⁾. Ab einer Gesamtbedeckung von ca. 4ML findet sich also im Rahmen der Meßgenauigkeit kein Fe mehr in der obersten Atomlage, d.h. ab hier wächst ein reiner Cr-Film.

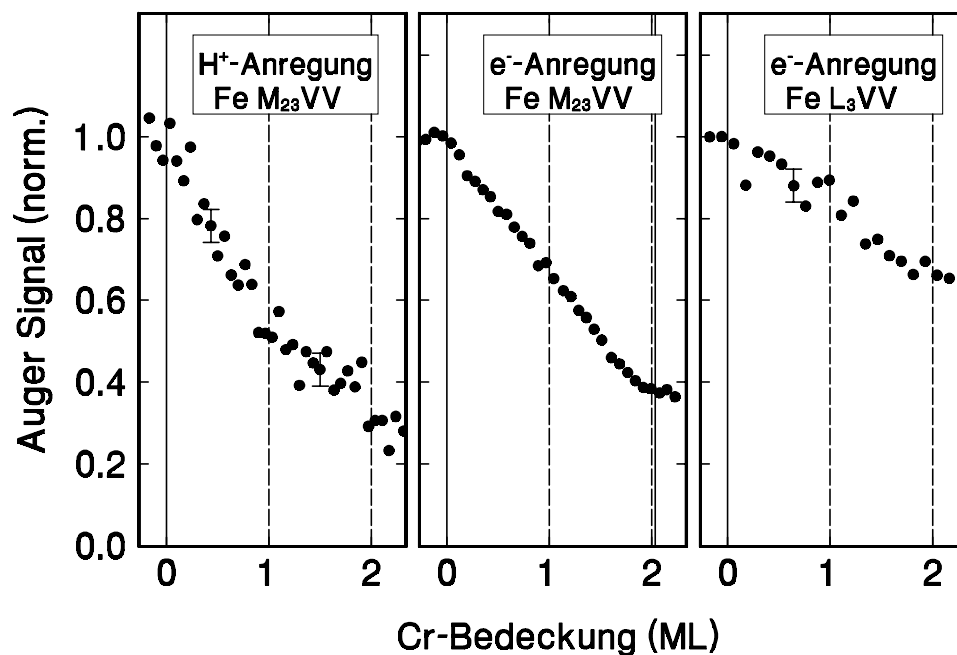


Abb. 6-12 Vergleich der Fe-Auger-Signale mit unterschiedlichen Informationstiefen (siehe Text) beim Wachstum der ersten zwei Monolagen Cr/Fe(100) ($T\approx 600\text{K}$, $F=1\times 10^{-3}\text{MLs}^{-1}$).

Obgleich die Berechnung des Konzentrationsprofils nur für die vollen Monolagen durchgeführt wurde, kann man aufgrund des (lagenweise) linearen Verlaufs der Auger-Signale von einer gleichmäßigen Änderung des Cr-Anteils in der Oberfläche

¹¹ Das berechnete Konzentrationsprofil bleibt auch bei einer Änderung der Signaltiefe um den verdoppelten Vertrauensbereich unverändert.

¹² Die Formänderung der Protonen-induzierten Spektren liegt ab einer Cr-Bedeckung von ca. 4ML im Bereich des experimentellen Fehlers und kann wegen der Unsicherheit in der Anpassung des Untergrundes von inelastischen Sekundärelektronen nicht mehr eindeutig bestimmt werden.

ausgehen. Dies ist für die Entwicklung eines entsprechenden Wachstums-Modells wesentlich (siehe Abschnitt 4.2).

Ein Vergleich der hier erhaltenen Daten mit den veröffentlichten Studien anderer Gruppen ist nur bedingt möglich, da nur Sub-Monolagen-Bedeckungen von Cr/Fe studiert wurden. So finden Venus *et al.* [VH96] mittels Auger-Elektronen-Beugung für eine halbe Monolage Cr/Fe(100) bei einer Wachstumstemperatur von 570K ein Konzentrationsprofil von $51\pm 4\%$ Cr in der obersten Atomlage, $30\pm 4\%$ Cr in der ersten und $19\pm 4\%$ in der zweiten Lage unter der Oberfläche. In den STM-Studien von Davis *et al.* [DSP96] wurden insbesondere Cr-Bedeckungen bis ca. 0.2 ML studiert, wobei die elementspezifische Abbildung durch die Sensitivität auf Oberflächenzustände des Fe und Cr in atomarer Auflösung erreicht wurde. Hier finden die Autoren bei 570K sowohl in der Substratlage als auch in den Inseln jeweils $22\pm 3\%$ der gesamten deponierten Cr-Menge, so daß auch hier etwas mehr als 50% Cr unter der Oberfläche eingelagert ist.

Inzwischen veröffentlichte theoretische Studien zum Wachstum von Cr/Fe [NWZ98, WND98] bestätigen die Interdiffusion aus energetischen Gründen, wobei der Austausch der Atome während der Oberflächendiffusion favorisiert wird und sich das Wachstum der Inseln dementsprechend über die Aggregation von Cr- und Fe-Atomen fortsetzt. Diese Ergebnisse sind mit den Resultaten aus den hier vorgestellten Studien gut vereinbar und zeigen die starke Tendenz der Grenzflächeninterdiffusion während des anfänglichen Wachstums von Cr auf Fe(100).

Anhand der zeitlichen Stabilität des Auger-Signal-Verhältnisses Cr/Fe nach dem Wachstum der ersten Monolage Cr (Abb. 6-13) kann man ablesen, daß die Austauschprozesse an der Oberfläche schon während des Wachstums weitestgehend abgeschlossen sind. So findet man nur für das Protonen-induzierte Signal, dessen Signaltiefe auf die Oberflächen-Lage begrenzt ist, im Anschluß an die Deposition noch eine sichtbare Änderung, die im Laufe der Zeit aber abklingt. Auch für das Elektronen-induzierte Signal ist die geringfügige Abnahme nach der Deposition noch zu sehen, was nicht verwundert, da die Oberfläche hier bei einer Signaltiefe von ca. 2.4ML noch einen erheblichen Anteil am Gesamtsignal hat. Für das hochenergetische L_3VV -Signal, dessen Informationstiefe schon etwa 6ML ausmacht, fallen die reinen Oberflächen-Prozesse nicht mehr so stark ins Gewicht und das Signal bleibt auf konstanter Höhe. Die leichte Abnahme der $M_{23}VV$ -Signal-Verhältnisse kann hier also in der Hauptsache auf die bei ca. 620K noch stattfindenden strukturellen Umordnungen an der Oberfläche nach der Deposition zurückgeführt werden (vgl. Fe/Fe(100) in Abschnitt 6.1). Das Cr bleibt dabei in den obersten Atomlagen, in die es während des Wachstums der ersten Lage eingebaut wurde. Erst bei Temperaturen oberhalb etwa 800K kommt es zu einer deutlichen Interdiffusion des deponierten Cr in das Volumen, was mit einer sichtlichen Abnahme der Auger-Signal-Verhältnisse Cr/Fe auch für größere Informationstiefen einhergeht. Dies bestätigt auch noch einmal die überwiegende Einlagerung des Cr nur in oberflächennahe Schichten während des Wachstums bei Temperaturen deutlich unter 800K.

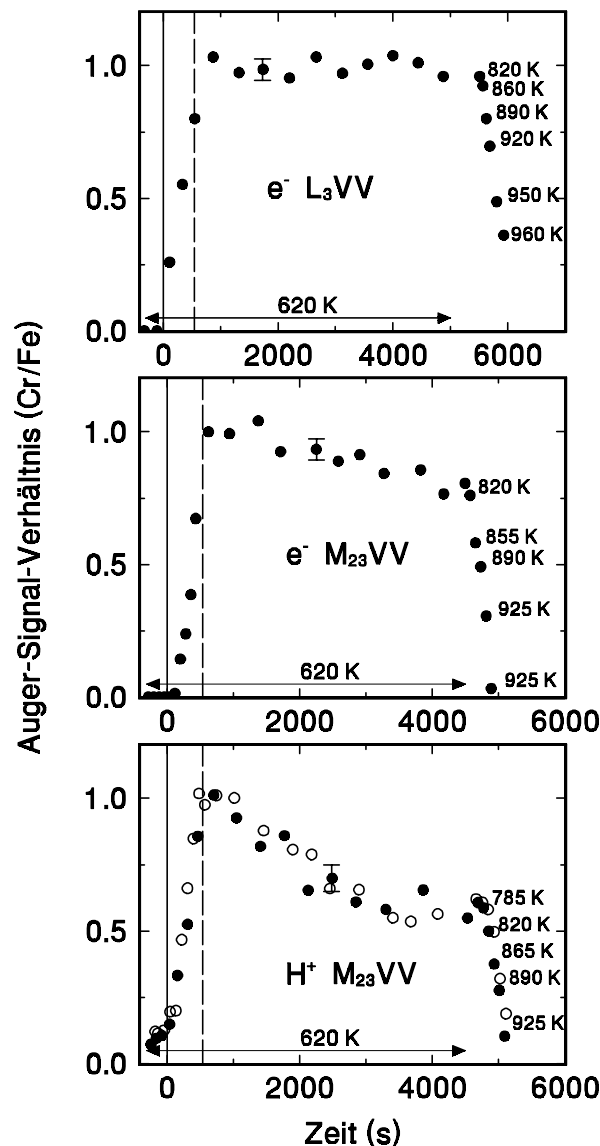


Abb. 6-13 Auger-Signal-Verhältnis Cr/Fe unterschiedlicher Informationstiefen von 1ML Cr/Fe(100) während des Wachstums und nach Abschluß der Deposition sowie beim anschließenden Tempnen zur Untersuchung der Filmstabilität gegenüber Eindiffusion.

6.3 MN-FILME AUF Fe(100)

Mn-Filme auf Fe(100) sind durch ihre kontrovers diskutierten magnetischen Eigenschaften in den letzten Jahren vermehrt Gegenstand entsprechender Studien geworden. Dabei spielte die Untersuchung der Wachstumseigenschaften nur eine untergeordnete Rolle, obwohl aus theoretischen Studien hervorgeht, daß diese einen nicht unerheblichen Einfluß auf die magnetischen Kopplungseigenschaften zum Fe(100)-Substrat haben können [WF95, HB98], was für den Fall morphologischer Unterschiede der Mn-Zwischenschicht im System Fe/Mn/Fe(100) bereits experimentell bestätigt werden konnte [TUC00]. Auch dem theoretisch vorhergesagten Einfluß einer möglichen Grenzflächen-Interdiffusion beim Wachstum [NWZ97, HB98] analog zum System Cr/Fe(100) wurde experimentell bislang nur ansatzweise nachgegangen [WH93, AFB98, TUC00].

Die bisherigen Untersuchungen zum Wachstum von Mn auf Fe(100) beschränken sich überwiegend auf Temperaturen um 300K. Lediglich in einer jüngeren Studie von Tulchinsky *et al.* [TUC00] wurde das Wachstum von Mn/Fe(100) auch bei höheren Temperaturen im Zusammenhang mit den magnetischen Eigenschaften des Filmsystems mittels RHEED untersucht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Wachstum der Mn-Filme mit der streifenden Ionenstreuung und Auger-Spektroskopie in Anlehnung an die erfolgreichen Studien der Cr-Filme auf Fe(100) in einem Temperaturbereich von 300..600K analysiert. Besondere Aufmerksamkeit wurde dabei dem Verhalten bei Filmdicken um vier Monolagen gewidmet, da hier offenbar strukturelle Änderungen auftreten.

6.3.1 MORPHOLOGISCHE STRUKTUR DER MN-FILME

Mn kann in vier verschiedenen Modifikationen auftreten: Bei niedrigen Temperaturen sind die einfach kubischen α - und β -Modifikationen mit großen Einheitszellen stabil ($a_{\text{fct}} \approx 3.8\text{\AA}$, $c_{\text{fct}} \approx 3.5..3.6\text{\AA}$ [KTM96]), während bei hohen Temperaturen die fcc(γ)- und bcc(δ)-Phasen auftreten. Obwohl die bcc-Struktur bei Raumtemperatur bisher nicht stabilisiert werden konnte, gibt es Hinweise, daß diese Phase beim Wachstum auf verschiedenen Substraten bei Raumtemperatur präpariert werden kann [HAL87, JKP89, EJ90]. So finden Purcell *et al.* [PJM92] aus LEED-Studien an auf Fe(100) bei 325K gewachsenen Mn-Filmen verschiedener Filmdicken eine gute Anpassung der lateralen Gitterstruktur an das Fe(100). An einem $\sim 15\text{ML}$ dicken Film wurde auch die vertikale Gitterkonstante des bct-verspannten Mn zu $c = 3.27\text{\AA}$ bestimmt. Weiterhin berichten die Autoren von einem mit der Filmdicke zunehmenden diffusen Untergrund in den LEED-Bildern und deutlichen Strukturänderungen bei Filmdicken um 20ML. Die begleitenden RHEED-Oszillationen dieser Studie zeigen wiederholt stark gedämpfte Oszillationen mit verschwindender Intensität bei $\Theta \approx 20 \pm 5\text{ML}$ und regelmäßig eine Änderung in Amplitude und Phase bei ca. 2 Monolagen Mn-Bedeckung. Bei der Filmdicke von 2..3ML ($T = 300\text{K}$) berichten Kim *et al.* [KTM96] aus LEED-Untersuchungen von einem vertikalen Mn-Lagenabstand um 1.3\AA , der bei dickeren Filmen ($\sim 14\text{ML}$) in guter Übereinstimmung mit dem Ergebnis von Purcell *et al.* auf 1.614\AA angewachsen ist. Andrieu *et al.* [AFB98] finden bei ca. 300K aus Röntgenabsorptionsmessungen einen Interlagenabstand im Mn-Film von ca. 1.4\AA im Bereich der ersten 4ML, der bis $\Theta \sim 20\text{ML}$ auf ca. 1.5\AA anwächst. Ausführlichere RHEED-Studien von Tulchinsky *et al.* [TUC00] bestätigen eine deutliche Änderung der Oberflächen-Morphologie des Mn-Films sowohl bei $\Theta \sim 4\text{ML}$ als auch bei $\Theta \sim 20\text{ML}$ für Temperaturen zwischen ca. 300K und 520K.

Dies alles weist auf ein transient lagenweises Wachstum des Mn-Films bei ca. 300K hin, wobei strukturelle Änderungen bei $\Theta \sim 2\text{ML}$ und $\Theta \sim 20\text{ML}$ vermutet werden. Eine Abschätzung der Gitterfehlanpassung als einen wesentlichen Parameter für das Sub-Monolagen-Wachstum und als Ursache für Strukturänderungen erfolgt aus der Extrapolation der bcc-Hochtemperatur-Gitterkonstante auf Raumtemperatur ($a_{\text{Mn}} = 2.95\text{\AA}$) und liefert einen Wert von ca. 3.2% [PJM92].

Zur Überprüfung der lateralen Struktur dünner Mn-Filme auf Fe(100) wurden analog zu den Cr-Filmen (vgl. Abschnitt 6.2.1) Azimut-abhängige Messungen mit der streifenden Streuung von 25keV He^+ -Ionen am Fe-Substrat und bei verschiedenen

Filmdicken durchgeführt. Statt der spekularen Streuausbeute wurde hier der Targetstrom aufgenommen, da dieser unempfindlicher gegenüber der Morphologie ist. Die Sensitivität auf die niedrigindizierten Richtungen und deren laterale Atomabstände der Oberfläche bleibt bei nicht zu kleinen Inselgrößen erhalten und die Sekundärelektronenausbeute entlang der Kanalrichtungen wird aufgrund der vergleichbaren Ordnungszahl und Elektronendichte von Fe und Mn wenig beeinflusst [BSV75, PIW97d]. Die Ergebnisse dieser Studien beim Wachstum der Mn-Filme mit $T=300\text{K}$ sind in der Abb. 6-14 dargestellt. Wie man sieht, bleibt die Struktur der Targetstromkurven von der unbedeckten Fe(100)-Oberfläche auch bei der Bedeckung mit mehreren Mn-Lagen erhalten. In allen Kurven sind die Strukturen des quadratischen bcc-(100)-Oberflächen-Gitters für mindestens fünf verschiedene Kanalrichtungen an unveränderter Position zu finden (vertikale Linien). Demzufolge wachsen die Mn-Filme epitaktisch in einem quadratischen Gitter parallel zum Substrat-Gitter.

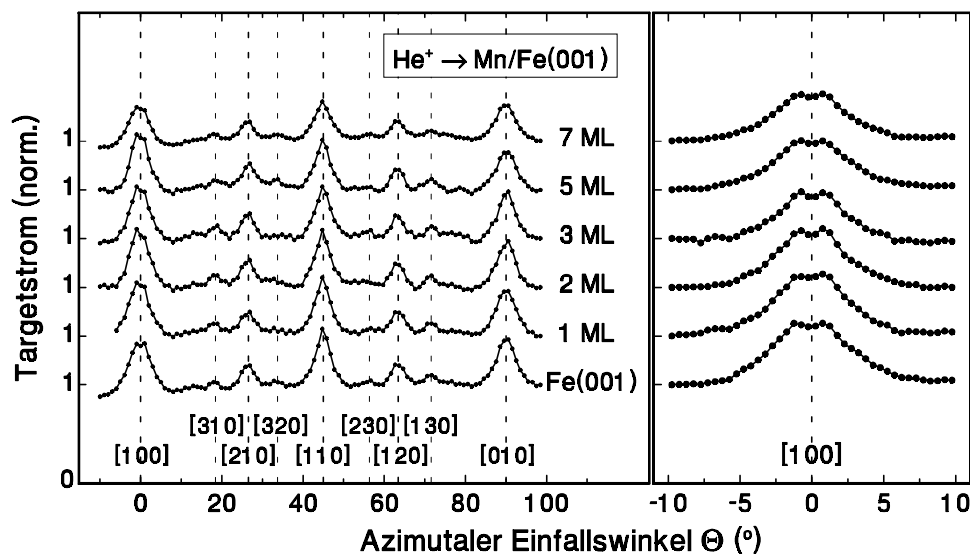


Abb. 6-14 Normierter Targetstrom als Funktion des azimutalen Einfallswinkels (He^+ , 25keV , $\Phi_{\text{in}}=1.75^\circ$) für die saubere und Mn-bedeckte Fe(100)-Oberfläche bei einer Wachstumstemperatur von 300K . Die vertikalen Linien zeigen die niedrigindizierten Kanalrichtungen des quadratischen Oberflächen-Gitters an.

Aus der unveränderten Breite der Peaks kann man prinzipiell auf die näherungsweise Erhaltung der Atomabstände entlang der Kanäle schließen. Allerdings ist die experimentelle Auflösung der Strukturen nicht ausreichend, um etwaige Relaxationen des Films in der Größenordnung der Gitterfehlانpassung von $\sim 3\%$ mit Sicherheit festzustellen. Eine genaue Beobachtung des Targetstroms bei der Streuung um die $\langle 001 \rangle$ -Richtung zeigt anhand des Intensitätseinbruchs bei der Streuung parallel $\langle 001 \rangle$, daß auch der Fokussierungseffekt durch die Atomreihe in der zweiten Atomlage im bcc-Gitter für alle untersuchten Filmdicken vorhanden ist. Demzufolge kann man auf das pseudomorphe Wachstum der untersuchten Mn-Filme schließen. Bestätigt wird dieser Befund durch begleitende LEED-Untersuchungen, in denen sowohl bei 300K als auch bei 600K gewachsene Mn-Monolagen ein unverändertes (1×1) -Beugungsbild - aber mit höherem Untergrund gegenüber dem Fe(100) - beobachtet wurde. Für die von Wu und Freeman vorhergesagte $c(2 \times 2)$ -Rekonstruktion vertikaler Atomabstände in der Mn-Monolage ("buckling") wurden keine Hinweise in der Form von Überstrukturen im LEED-Bild gefunden.

Zur Untersuchung des Wachstumsmodus der Mn-Filme wurde kontinuierlich die spekulare Streuintensität von 25keV H^+ -Ionen aufgenommen. Dabei wurde die Temperatur zwischen 300 und ca. 600K variiert. Wie bei den Cr-Filmen findet man mit zunehmender Temperatur aus der Erhöhung der spekularen Streuausbeute eine Verbesserung der Filmstruktur (Abb. 6-15). Die Oszillation der Streuausbeute zeigt auch hier die periodische Änderung der Oberflächenmorphologie eines (quasi) lagenweisen Wachstums der dünnen Filme an. Dennoch zeugen der kontinuierliche Abfall der Streuintensität und die nur schwache Ausbildung der Intensitätsmaxima der Monolagen von einem raschen Übergang zu einer rauen Filmoberfläche durch das frühzeitige Einsetzen einer Nukleation in der folgenden atomaren Lage.

Eine grobe Abschätzung aus dem Intensitätsverlauf liefert bei der nominellen Bedeckung mit einer Monolage für Temperaturen um 600K einen Füllungsgrad der ersten Lage von ca. 80% und bei Raumtemperatur von ca. 73%, was deutlich unter den entsprechenden Werten für die Cr-Filme (95% bzw. 85%) liegt.

Der vergleichbar starke Abfall der Streuintensität zu Beginn des Wachstums zeugt vom einsetzenden Nukleationsprozeß im gesamten untersuchten Temperaturbereich. Demzufolge findet sich selbst bei ca. 600K kein Hinweis auf das Einsetzen des Step-Flow-Regimes, was hier im Vergleich zum Fe und Cr eine weitere Erhöhung der Diffusionsbarriere anzeigt. Ein Vergleich der spekularen Streuausbeuten bei ca. einer halben Monolage Mn/Fe(100) aus dem Experiment und der Simulation analog dem Modell bei den Cr-Filmen führt bei der Depositionsrate von $F \approx 2 \times 10^{-3} \text{ MLs}^{-1}$ auf Nukleationsabstände von ca. $25 \pm 10 \text{ \AA}$ bei 300K, $90 \pm 20 \text{ \AA}$ bei ca. 510K und $250 \pm 30 \text{ \AA}$ bei etwa 600K (Abb. 6-16). Diese Werte sind bei vergleichbarer Rate deutlich niedriger als für das System Cr/Fe(100).

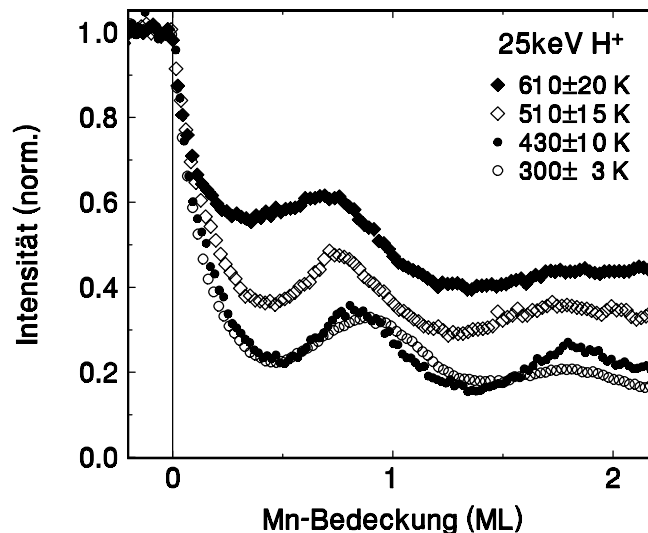


Abb. 6-15 Normierte spekulare Streuausbeute von 25keV H^+ ($\Phi_{in}=1.75^\circ$) beim Wachstum von Mn auf Fe(100) unter Variation der Wachstumstemperatur bei $F \approx 2 \times 10^{-3} \text{ MLs}^{-1}$.

Während bei dünnen Mn-Filmen sowohl bei 300K als auch bei 600K das Wachstum noch nahezu lagenweise voranschreitet, findet man ab einer Filmdicke von etwa vier Monolagen deutliche Unterschiede im Wachstumsmodus. Die entsprechenden Messungen der spekularen Streuausbeute sind in der Abb. 6-17 für das Wachstum der Mn-Filme dargestellt. Der bei 600K immer und bei 300K zeitweise beobachtete plötzliche Abfall der Streuintensität bei einer Mn-Bedeckung von ca. vier Monolagen weist auf eine abrupte Erhöhung der Oberflächenrauigkeit, was mit dem Einsetzen

eines verstärkten dreidimensionalen Film-Wachstums gleichzusetzen ist.⁽¹³⁾ Aus theoretischer Sicht [TSA93] ergibt sich für das bct-Mn/Fe(100) unter Einbeziehung der Gitterfehlانpassung $f=3.2\%$, der Größe des Burgervektors $b=2.866\text{\AA}$ und dem Poissonverhältnis $\nu=0.45$ [KTM96] bei einem Lagenabstand von $1.3..1.6\text{\AA}$ aus

$$h_c = \frac{b}{8\pi f} \left(\frac{1}{1+\nu} \right) \ln(4h_c / b)$$

eine kritische Filmdicke von $h_c=3..3.5\text{ML}$, ab der es im Film aufgrund der Relaxation von Gitterverspannungen zu deutlichen Strukturänderungen kommen kann. Das wird in den hier durchgeführten Messungen offensichtlich beobachtet. Diese Interpretation steht in guter Übereinstimmung mit der von Tulchinsky *et al.* ebenfalls häufig beobachteten abrupten Änderung der RHEED-Oszillationen bei $\Theta_{\text{Mn}} \sim 4\text{ML}$ für Wachstumstemperaturen zwischen 300K und 520K [TUC00], während Andrieu *et al.* eine Phasenverschiebung in den RHEED-Oszillationen bei $T=300\text{K}$ schon bei $\Theta_{\text{Mn}} \sim 2\text{ML}$ beobachtet haben.

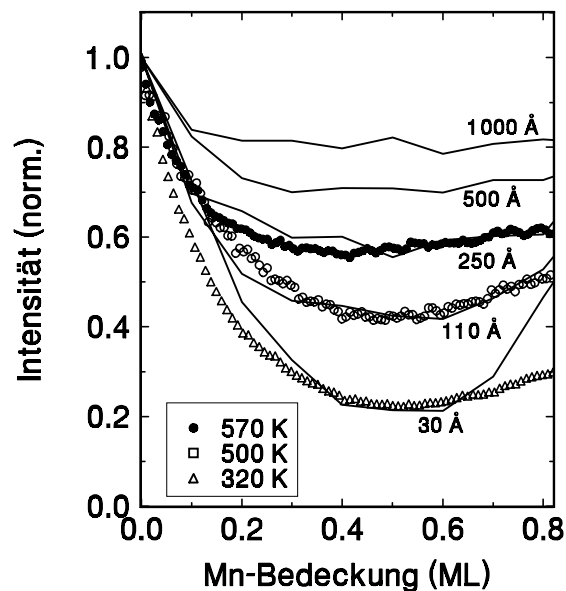


Abb. 6-16 Vergleich von Experiment (Symbole) und Simulation (Linien) der spekularen Streuausbeuten von 25keV H^+ beim Wachstum von Mn/Fe(100) zur Bestimmung der Nukleationsabstände [PIW97d].

Die unterschiedliche Wachstumskinetik aufgrund der unterschiedlichen Oberflächendiffusion bei hoher bzw. niedriger Temperatur führt dennoch zu unterschiedlichen Wachstumsmodi: Selbst wenn bei 300K die spekulare Streuintensität ab $\Theta \approx 4\text{ML}$ auf ein niedriges Niveau fällt, bleibt sie anschließend bis zu Bedeckungen über 10ML nahezu konstant und zeigt bei näherer Betrachtung noch eine lagenweise Oszillation, die auf die Fortsetzung des stationären Wachstums mit mehrlagiger Wachstumsfront weist. Sichtlich anders stellt sich das Wachstumsverhalten des Mn-Films bei hohen Temperaturen dar. Während man bis zu etwa vier Monolagen Mn-Bedeckung gegenüber niedrigeren Temperaturen aufgrund der besseren Ober-

¹³ Bei $T \approx 300\text{K}$ wurde dieser abrupte Übergang auf ein deutlich niedrigeres Niveau der spekularen Streuausbeute in unregelmäßigen Abständen beobachtet. Dementsprechend befindet sich der wachsende Mn-Film bei dieser Temperatur in einem metastabilen Zustand, und die Relaxation der aufgebauten Gitterverspannung findet nicht in jedem Fall statt. Erst bei Temperaturen oberhalb etwa 420K war dieser Übergang stets zu beobachten.

flächenqualität noch ein vergleichbar hohes Niveau der spekularen Streuausbeute findet, kommt es ab hier mit zunehmender Schichtdicke zu einer kontinuierlichen Abnahme der Streuintensität, die sogar deutlich unter das Niveau der Messung bei niedriger Temperatur sinkt. Dieses Verhalten ist typisch für den Übergang vom Lagen- zum Inselwachstum (Stranski-Krastanov-Mode).

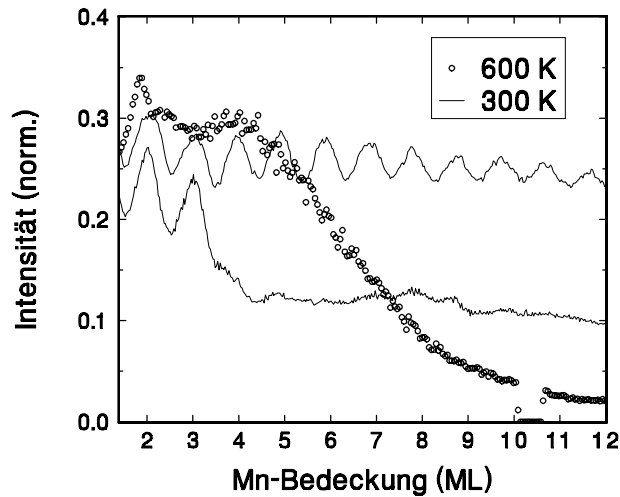


Abb. 6-17 Normierte spekulare Streuausbeute von 25keV H^+ ($\Phi_{in}=1.75^\circ$) beim fortgesetzten Wachstum von Mn auf Fe(100)

Um die Ergebnisse aus den Streumessungen zu untermauern, wurden zusätzliche Messungen mittels Auger-Spektroskopie durchgeführt, die ein geeignetes Mittel zur Unterscheidung von lagenweisem und Insel-Wachstum ist [AR89]. Zweckmäßig für die Untersuchung eines Übergangs im Wachstumsmodus bei der Filmdicke von vier Monolagen ist die Beobachtung der hochenergetischen L_3VV -Auger-Elektronen vom Fe-Substrat mit einer Informationstiefe von ca. sechs Monolagen. Insbesondere wird diese Linie aufgrund ihrer energetischen Lage (703eV) nicht von Sekundär-Elektronen angrenzender Fe- oder Mn-Linien (<651eV) beeinflusst, was die quantitative Auswertung begünstigt. Aus den während des Wachstums kontinuierlich aufgenommenen $N(E)$ -Spektren wurde das Auger-Signal aus der peak-to-peak-Höhe des numerisch abgeleiteten Spektrums $dN(E)/dE$ ermittelt. Ein Vergleich mit dem Signalverlauf der Fläche unter der Auger-Linie im normierten $N(E)$ -Spektrum nach Abzug eines linear angepaßten Untergrunds führte zu quantitativ nicht unterscheidbaren Datensätzen.

In der Abb. 6-18 ist der Verlauf der L_3VV -Auger-Signale für das Wachstum von mehr als 10 Monolagen Mn auf Fe(100) bei 300K bzw. 600K gezeigt. In beiden Fällen findet man bis etwa vier Monolagen einen praktisch linearen Abfall des Auger-Signals, der für das transient lagenweise Wachstum des Adsorbats steht. Während sich dieser Trend für den bei 300K gewachsenen Film über $\Theta \approx 4ML$ hinaus fortsetzt, findet man bei 600K an dieser Stelle einen Knick im Verlauf des Auger-Signals, gefolgt von einer nur noch unmerklichen Abnahme der Signalthöhe. Das bestätigt das Einsetzen eines ausgeprägten Inselwachstums auf dem 4ML-Film bei hohen Temperaturen.

Das Verschwinden der Inselbildung bei niedrigen Temperaturen zeigt, daß das transient lagenweise Wachstum auf der eingeschränkten Diffusion der Adatome beruht und zu einem metastabilen Film mit Verspannungen führt.

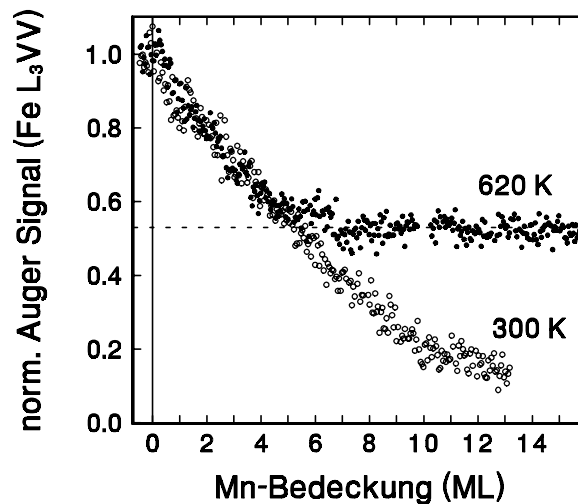


Abb. 6-18 Elektronen-induziertes Fe-Auger-Signal (L_3VV , normiert) beim Wachstum von Mn/Fe(100) bei 300 bzw. 620K.

Um die kritische Temperatur zu finden, bei der die für die Verspannung im metastabilen Film typischen Bindungen überwunden werden können, d.h. bei der der Übergang vom transient lagenweisen Wachstum zum Stranski-Krastanov-Wachstum erfolgt, wurde bei 300K ein 13 Monolagen dicker Mn-Film präpariert und langsam getempert. Während des Wachstums und dem Heizen wurden gleichzeitig das spekulare Streusignal (H^+ , 25keV, $\Phi_{in}=1.75^\circ$) und die L_3VV -Fe-Auger-Line aufgenommen (Abb. 6-19). Wie erwartet, findet man während des transient lagenweisen Wachstums die starke Abnahme des Auger-Signals und die auf niedrigem Niveau lagenweise oszillierende spekulare Streuintensität. Beim anschließenden (langsamen) Heizen des Films erhöht sich zunächst die Intensität der gestreuten Projektile bei unveränderter Größe des Auger-Signals. Dies ist auf einen Abbau der Oberflächen-Rauhigkeit durch einsetzende Ausheilprozesse an der Film-Oberfläche zurückzuführen. Bei Erreichen einer Temperatur von ca. 420K wird dieser Prozeß von einer starken Zunahme der Oberflächen-Rauhigkeit abgelöst, was durch die plötzliche Abnahme des Streusignals angezeigt wird. Folglich werden bei dieser Temperatur die Verspannungen durch das Aufreißen des Mn-Films abgebaut und dreidimensionale Strukturen gebildet. Zwischen diesen Strukturen können wieder mehr Auger-Elektronen vom Fe-Substrat an die Oberfläche gelangen, was die gleichzeitig einsetzende Erhöhung des entsprechenden Auger-Signals bewirkt. Diese Zunahme des Auger-Signals beim Aufreißen des Mn-Films ist nicht mit dem Einsetzen einer verstärkten Grenzflächen-Interdiffusion zu verwechseln (wie von Walker *et al.* [WH93] interpretiert), da diese erst bei deutlich höheren Temperaturen einsetzt, was im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

Zusammenfassend ist aus morphologischer Sicht festzustellen, daß Mn-Filme auf Fe(100) epitaktisch und pseudomorph wachsen. Die einzelnen Lagen bilden sich gegenüber den Cr-Filmen auf Fe(100) aufgrund der frühzeitig einsetzenden Nukleation auf Adsorbat-Inseln deutlich schlechter aus. Eine Erhöhung der Temperatur führt zwar zu kleineren Nukleationsdichten, aber zu keiner wesentlichen Verbesserung des anfänglichen Lagenwachstums bezüglich des Füllungsgrades. Während der Abbau von Verspannungen aufgrund der Gitterfehlانpassung von Mn und Fe oberhalb etwa 420K ab einer kritischen Filmdicke von ca. 4 Monolagen zu ausgeprägter Insel-Bildung führt, können die Mn-Filme bei niedrigeren Temperaturen

bis zu Filmdicken deutlich über 10 Monolagen metastabil im stationär lagenweisen Wachstum präpariert werden.

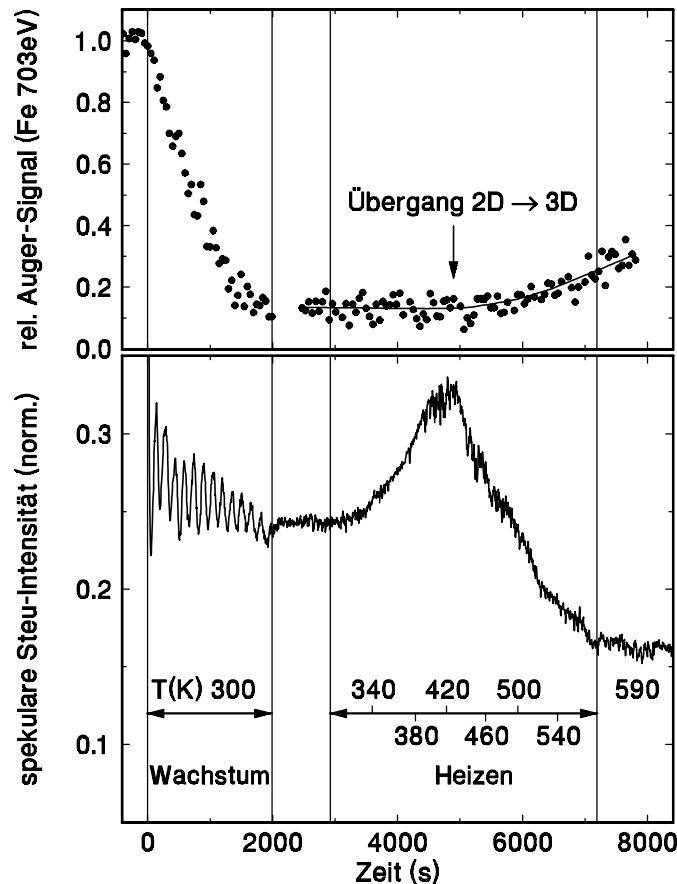


Abb. 6-19 Normierte Signale der Fe- L_3 VV-Auger-Linie und der spekularen Streuausbeute (25keV H^+ $\Phi_{in}=1.75^\circ$) bei Wachstum (300K) und anschließendem Tempern von 13ML Mn auf Fe(100).

6.3.2 CHEMISCHE STRUKTUR DÜNNER MN-FILME AUF Fe(100)

Bereits bei der Untersuchung der Cr-Filme auf Fe(100) konnte gezeigt werden, daß es während des Wachstums zu einer erheblichen Interdiffusion an der Grenzfläche kommt (Abschnitt 6.2.2). Zur Kontrolle auf vergleichbare Vorgänge wurde auch für die Mn-Filme die chemische Struktur des wachsenden Films im Bereich geringer Schichtdicken studiert. In gleicher Weise wurden hier sowohl die Protonen-induzierte als auch die Elektronen-induzierte Auger-Spektroskopie angewendet. Die quantitative Bestimmung des Auger-Signals der M_{23} VV-Linien vom Mn und Fe stellt sich gegenüber dem System Cr/Fe(100) mit höheren Schwierigkeiten dar, da sich die entsprechenden Auger-Linien zum Teil überlagern (vgl. Abb. 6-20). Deshalb konnte das elementspezifische Auger-Signal bei Vorhandensein beider Atomsorten im Bereich der Informationstiefe nicht aus der peak-to-peak-Höhe im numerisch differenzierten Spektrum $dN(E)/dE$ bestimmt werden.

Um dennoch eine quantitative Analyse der Auger-Spektren durchzuführen, wurden zunächst die reinen M_{23} VV-Auger-Signale vom Fe am unbedeckten Substrat und vom Mn an dicken Filmen ($\Theta \geq 8$ ML) aus den normierten Spektren ermittelt, um in einem anschließenden "least-square"-Fit die jeweiligen Anteile der Elementspektren

im zusammengesetzten Spektrum (Fe+Mn) zu berechnen. Bei dem dafür notwendigen Abzug des Sekundär-Elektronen-Untergrundes wurden verschiedene Methoden angewendet und die Ergebnisse miteinander verglichen. Im einfachsten Fall wurde der Untergrund numerisch durch einen gewichteten Polynomial-Fit dritter Ordnung an die Spektren außerhalb der Auger-Linien ermittelt [HLS76]. Geringfügige Variationen des Untergrundes – insbesondere an der niederenergetischen Kante der Auger-Linien – führten zu keinen signifikanten Änderungen in den ermittelten Anteilen der Elementspektren im zusammengesetzten Spektrum. In den Elektronen-induzierten Spektren konnte für alle Spektren der gleiche Untergrund verwendet werden, da der Sekundärelektronen-Peak ($E \sim 10 \text{ eV}$) nur wenig von der Morphologie beeinflusst wird. Dagegen kommt es bei der Anregung durch streifend gestreute Protonen mit zunehmender Rauigkeit des Mn-Films aufgrund der niedrigen Anregungstiefe zu einer relativen Zunahme inelastisch gestreuter Sekundär-Elektronen. Deshalb mußte hier die Höhe des Untergrundes an die jeweiligen Spektren angepaßt werden. Die so ermittelten Untergrundsignale sind in der Abb. 6-20 (oben) als gestrichelte Linien gezeigt. Nach dem Untergrundabzug konnte der Anteil der elementspezifischen Auger-Signale (Abb. 6-20 unten) berechnet werden um so die Änderung des Auger-Signals beim Wachstum bzw. Tempern der Filme zu ermitteln.

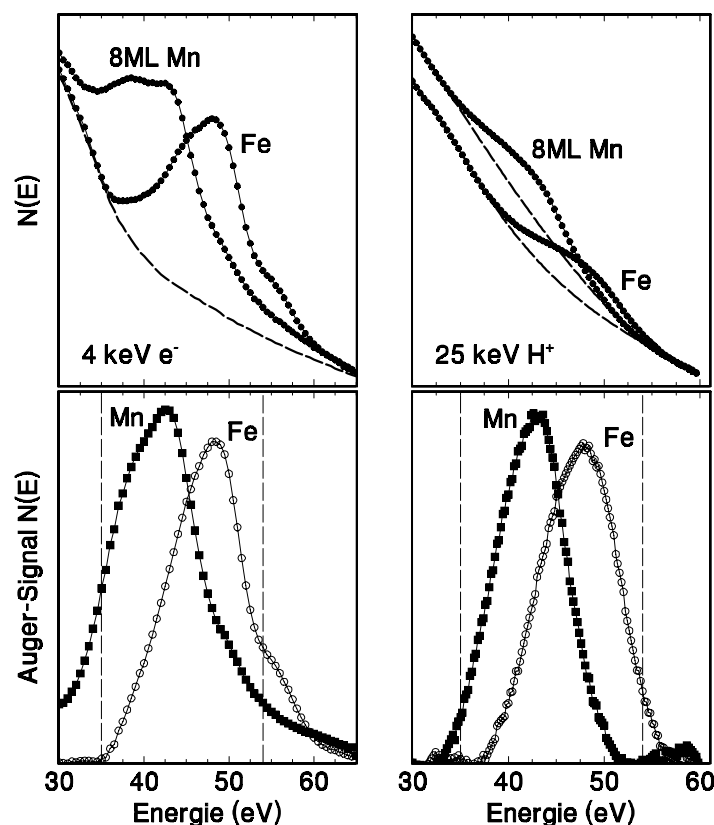


Abb. 6-20 Sekundär-Elektronen-Spektren der sauberen Fe(100)-Oberfläche und eines 8ML dicken Mn-Films nach Anregung mit Elektronen ($E_p=4 \text{ keV}$) bzw. streifend einfallenden Protonen (25 keV , $\Phi_{in}=1.5^\circ$) mit Sekundär-Elektronen-Untergrund (oben) zur Ermittlung der $M_{23}VV$ -Auger-Signale von Mn und Fe (unten). Der Bereich zur Ermittlung der elementspezifischen Signale aus den gemischten Spektren ist im unteren Teil durch gestrichelte Linien angedeutet.

Zunächst wurde die Stabilität eines 2-Monolagen dicken Mn-Films als Funktion der

Temperatur qualitativ untersucht, um festzustellen, ob es wie beim Cr eine Grenze gibt, ab der das Mn eine verstärkte Diffusion in das Fe-Substrat zeigt. Dazu wurde der Mn-Film bei 300K präpariert und anschließend langsam getempert. Gleichzeitig wurden das spekulare Streusignal streifend gestreuter 25keV H^+ -Projekte zur Kontrolle morphologischer Änderungen und das Elektronen-induzierte Auger-Spektrum im Bereich der $M_{23}VV$ -Linien von Mn und Fe (20..65eV) aufgenommen. Das normierte Verhältnis der Auger-Signale von Fe (47eV) und Mn (40eV) gestattet aufgrund der kleinen Informationstiefe von $\lambda < 3ML$ Rückschlüsse auf das Löslichkeitsverhalten vom Mn im Fe-Substrat. Anhand der Zunahme des spekularen Streusignals ist ab ca. 400K eine geringfügige Verringerung der Stufendichte durch einsetzende Ausheilprozesse an der Oberfläche festzustellen (Abb. 6-21b). Dabei bleibt das Auger-Spektrum nahezu unverändert. Mit dem Auftreten verstärkter thermischer Schwingungen der Oberflächen-Atome ab ca. 650K (vgl. Abschnitt 5.1.3) kommt es zu massiven Umordnungen, die sich als Ausheilprozeß in der starken Erhöhung des spekularen Streusignals⁽¹⁴⁾ manifestiert. Simultan steigt das Auger-Signal-Verhältnis deutlich zugunsten des Fe an.

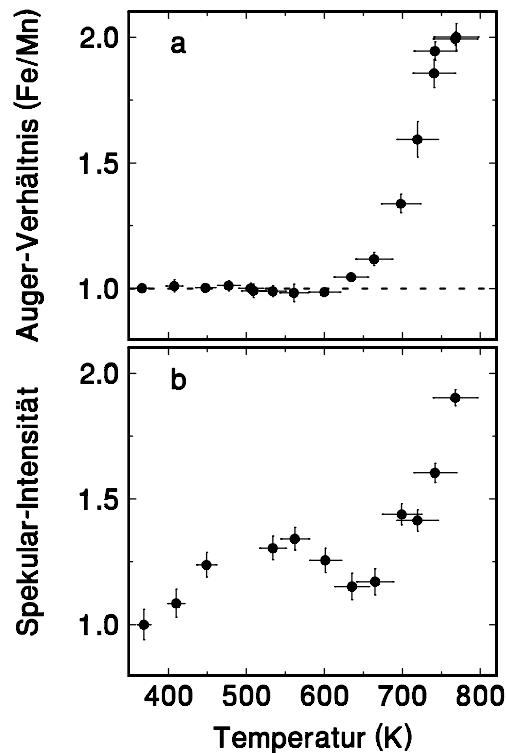


Abb. 6-21 Verhältnis Elektronen-induzierter Auger-Signale ($M_{23}VV$) von Fe/Mn (a) und spekulare Streuausbeute (25keV- H^+ , $\Phi_{in}=1.7^\circ$) (b) von einem bei 300K gewachsenen und anschließend getemperten 2ML-Mn-Film auf Fe(100)

Da angesichts der Zunahme des Streusignals ein Aufreißen des Films als Ursache für die Verstärkung des Fe-Auger-Signals ausscheidet und eine Kontrolle der hochenergetischen Mn-Auger-Linien (542..636eV) nur eine geringe Abnahme im Signal ($\lambda \approx 8ML$) anzeigt, kann man eindeutig darauf schließen, daß sich das Mn oberhalb etwa 650K im Fe löst. Dementsprechend wurden für die Präparation der Mn-Filme auf Fe(100) nur maximale Temperaturen bis ca. 600K angewendet.

¹⁴ Ohne den Ausheilprozeß würde die spekulare Streuintensität mit zunehmender Temperatur wegen der Verbreiterung der Streuverteilung abnehmen (vgl. Abschnitt 5.1.3).

In der Abb. 6-22 sind einige Spektren der $M_{23}VV$ -Auger-Linien gezeigt, die im Verlauf des Wachstums von Mn auf Fe(100) bei $T=440\pm 20\text{K}$ nach Anregung mit streifender Protonen-Streuung bzw. mit 4keV-Elektronen aufgenommen wurden. Zum Vergleich sind jeweils die Element-Spektren vom unbedeckten Fe(100) und von einem ca. 10ML dicken Mn-Film eingetragen. Wie bei den Cr-Filmen erkennt man auch hier bereits an den Protonen-induzierten Auger-Spektren im Bereich der ersten zwei Monolagen, daß die Oberfläche neben dem Mn auch noch zu einem hohen Maß Fe enthält. Dabei ist der Fe-Anteil bei einer Monolage Mn bedeutend höher als aus dem entsprechenden Bedeckungsgrad von ca. 80% zu erwarten wäre. Folglich findet auch hier eine Interdiffusion an der Grenzfläche statt. Erst ab einer Mn-Bedeckung von ca. 4..5ML ändert sich das Protonen-induzierte Auger-Signal nicht mehr. Das gleiche Verhalten findet man entsprechend der größeren Informationstiefe für die Elektronen-induzierten Auger-Signale bei Bedeckungen mit zwei zusätzlichen Monolagen Mn. Folglich ist mindestens ab einer Bedeckung mit vier Monolagen mit einer reinen Mn-Oberfläche zu rechnen.

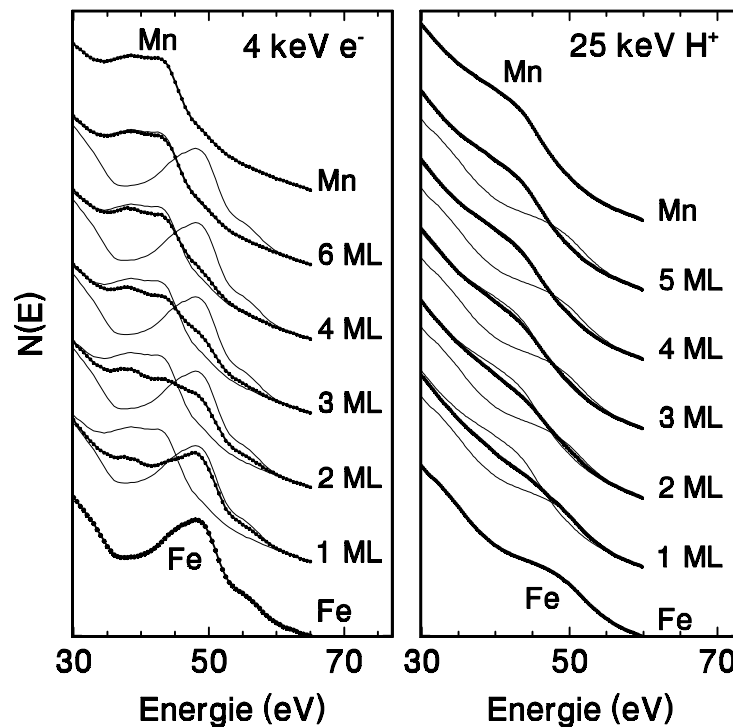


Abb. 6-22 Entwicklung der Auger-Spektren beim Wachstum von Mn/Fe(100) bei Anregung mit Protonen (25keV, $\Phi_{in}\approx 1.5^\circ$) bzw. 4keV-Elektronen ($\Phi_{in}=33^\circ$) bei $T=440\pm 10\text{K}$.

Für eine quantitative Analyse des Konzentrationsprofils an der Grenzfläche ist auch hier die genauere Bestimmung der Informationstiefen und die Berücksichtigung der lagenweisen Bedeckungsgrade im Film notwendig. Im Fall der Anregung mit Elektronen wird die Informationstiefe wie bei den Cr-Filmen (siehe Abschnitt 6.2.2) aus dem Verhältnis der Auger-Signale aufeinanderfolgender Lagen entsprechend der Abb. 6-23 bei größeren Bedeckungen ermittelt. In guter Übereinstimmung mit den entsprechenden Messungen an Cr-Filmen erhält man hier eine Informationstiefe für die Elektronen-Anregung von $\lambda=2.4\pm 0.3\text{\AA}$. Unter Verwendung dieser Austrittstiefe für die Auger-Elektronen und der Ionisationswahrscheinlichkeit der M_{23} -Schale [HJK75] in Abhängigkeit vom Stoßparameter der streifend einfallenden Protonen konnte aus der Simulation des Streuprozesses am rauhen Film (Stufenabstand $\approx 250\text{\AA}$, siehe

Abschnitte 4.1 und 6.3.1) die effektive Informationstiefe für die Protonen-Anregung (25keV, $\Phi_{in} \approx 1.5^\circ$) zu $\lambda = 0.84 \text{ \AA}$ abgeschätzt werden [IPW98].

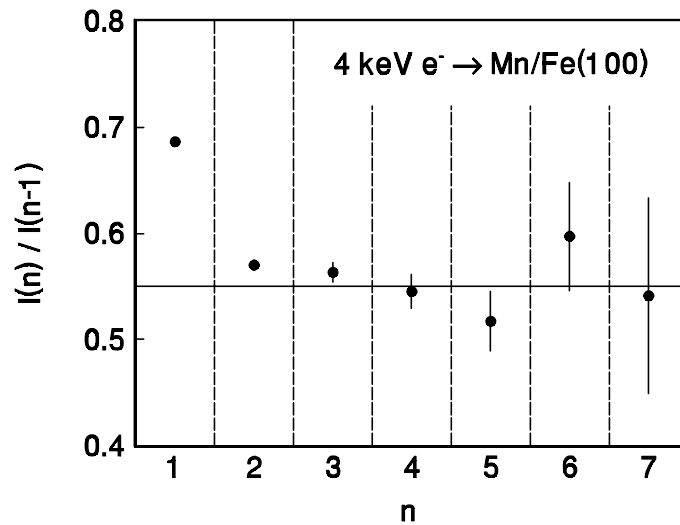


Abb. 6-23 Verhältnis der Fe- $M_{23}VV$ -Auger-Signale bei nominellen Mn-Bedeckungen mit n und $(n-1)$ Monolagen zur Bestimmung der Informationstiefe λ . Der Mittelwert (Linie) wurde für $n \geq 3$ ermittelt.

Aus dem Verlauf der Fe-Auger-Signale kann nun unter Variation der Mn-Konzentration in den einzelnen atomaren Lagen wie bei den Cr-Filmen das Konzentrationsprofil durch Anpassung an die experimentellen Daten (Abb. 6-24) näherungsweise bestimmt werden. Das schrittweise Vorgehen zur Bestimmung der lagenweisen Zusammensetzung des Films wird im folgenden näher beschrieben.

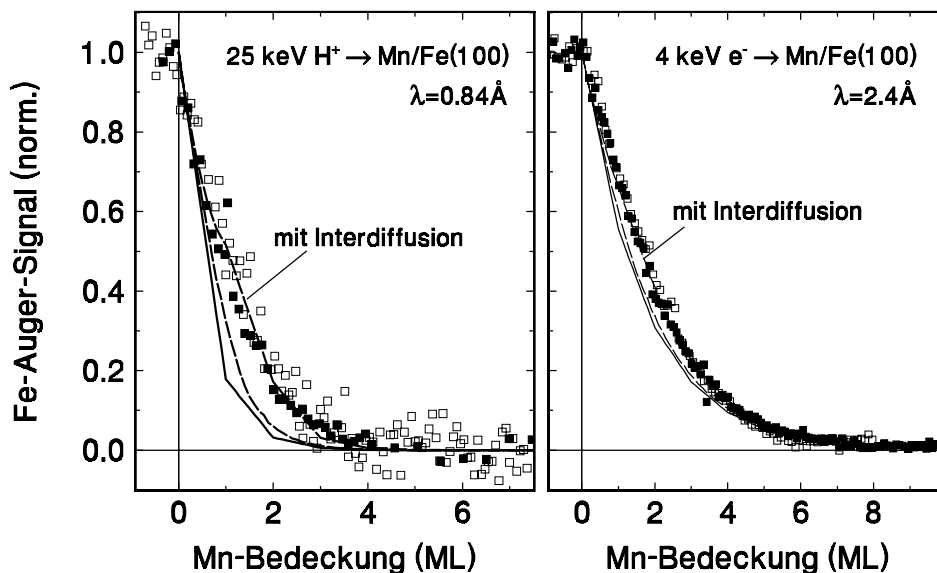


Abb. 6-24 Verlauf der Fe- $M_{23}VV$ -Auger-Signale beim Wachstum von Mn auf Fe(100) bei $T = 600 \pm 20 \text{ K}$ nach Anregung mit 25keV-Protonen mit $\Phi_{in} \approx 1.5^\circ$ (a) und 4keV-Elektronen (b). Die offenen bzw. geschlossenen Symbole sind Daten verschiedener Messungen und demonstrieren die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse. Zum Vergleich sind die berechneten Abhängigkeiten des Auger-Signals bei den entsprechenden Informationstiefen für das ideale Lagenwachstum (geschlossene Linien) und für das transient lagenweise Wachstum (gestrichelte Linien) entsprechend den Ergebnissen aus Abschnitt 6.3.1 mit und ohne Interdiffusion gezeigt (homogene Mn-Verteilung innerhalb der Lagen).

Ohne Berücksichtigung der Grenzflächen-Interdiffusion gelangt man im Bereich geringer Mn-Bedeckungen sowohl für die Protonen-induzierten als auch für die Elektronen-induzierten Auger-Signale – auch bei Berücksichtigung einer nur teilweisen Füllung der einzelnen Monolagen (siehe Abschnitt 6.3.1) – zu einem zu kleinen Auger-Signal. Folglich müssen Fe-Atome während des Filmwachstums durch Austauschprozesse in den Mn-Film gelangt sein. Werden die Konzentrationen von Fe und Mn in der obersten Substratlage und im gewachsenen Film kontinuierlich variiert (homogene Verteilung der Spezies innerhalb der Lagen), so erhält man zunächst unter der Voraussetzung eines idealen Lagenwachstums bei bester Anpassung an die experimentellen Daten für die Protonen-induzierten Messungen einen Mn-Anteil von $c_0=60\pm10\%$ in der obersten Adsorbatlage, $c_1=50\pm10\%$ in der ersten Adsorbatlage, $c_2=90\pm10\%$ in der zweiten Lage und nachfolgend reine Mn-Lagen im Film. Unter Berücksichtigung der nur teilweisen Füllung der Lagen beim transienten Lagen-Wachstum gelangt man zu ähnlichen Ergebnissen ($c_0=60\pm10\%$, $c_1=40\pm10\%$, $c_{2,3,\dots}=100\%$). Im Fall der Elektronen-induzierten Messungen nimmt unter der Annahme reinen Lagenwachstums mit $c_0=60\pm20\%$, $c_1=30\pm20\%$ und $c_{2,3,\dots}=100\%$ insbesondere der Mn-Anteil in der ersten Adsorbatlage noch weiter ab. Dies relativiert sich jedoch wieder bei Einbeziehung des transienten Lagenwachstums, und bestätigt – wenn auch mit größeren Unsicherheiten – die Ergebnisse der Protonen-induzierten Messung: $c_0=60\pm20\%$, $c_1=40\pm20\%$, $c_{2,3,\dots}=100\%$.

Wie man in der Abb. 6-24 sieht, sind für die verschiedenen Lösungen kaum Unterschiede im berechneten Signalverlauf auszumachen. Auch eine Variation der Informationstiefe λ als freien Parameter ruft keine Änderung im berechneten Konzentrationsprofil hervor, da sich λ aus dem Signalverlauf über mehrere Lagen selbst ergibt.

Im Bereich der ersten Monolage liegen insbesondere im Elektronen-induzierten Fe-Auger-Signal die experimentellen Werte sichtbar über dem berechneten Verlauf (unabhängig vom Wachstumsmodell). Das kann hier im Zusammenhang mit der Informationstiefe von mehr als einer Lage ($\lambda=2.4\pm0.3\text{\AA}$) mit einer möglichen Interdiffusion von Mn-Atomen unter die oberste Substratlage in Zusammenhang gebracht werden. In einer verbesserten Beschreibung des Wachstums muß also auch hier der Austausch von Mn und Fe einbezogen werden.

Eine detaillierte Betrachtung der Vorgänge beim Auftreten der Grenzflächen-Interdiffusion im frühen Wachstumsstadium eines heteroepitaktischen Systems mündet in die folgende Interpretation: Da ein Austausch der Atome in Bereichen unter der jeweiligen Oberflächenlage (nur über Zwischengitterplätze oder Fehlstellen) mit einer deutlich geringeren Wahrscheinlichkeit stattfindet als von Oberflächen-Atomen mit frei beweglichen Adatomen, ist davon auszugehen, daß nur oberflächennahe Substratlagen an der Interdiffusion beteiligt sind und darüber hinaus eine homogene Verteilung des Mn in den "Misch-Lagen" aus folgendem Grund nicht gewährleistet ist: Insbesondere beim Auftreten einer sehr starken Interdiffusion, wie man sie hier vorfindet, werden kleine Inseln zu Beginn des Wachstums überwiegend aus Fe-Atomen gebildet, die durch Platzwechsel mit den quasi freien Adsorbat-Atomen vor deren Bindung an Nukleationskeime auf die Oberfläche gelangt sind. Entsprechend werden die Mn-Atome überwiegend in die unbedeckte Substrat-Oberfläche eingebaut. Mit zunehmender Bedeckung und Inselgröße nimmt somit die Konzentration des Mn sowohl zu den Inselrändern hin gegenüber dem Insel-Zentrum

als auch in der noch freien Substratoberfläche gegenüber dem von den Inseln abgedeckten Bereich zu. Zur Veranschaulichung ist dieses Verhalten in der Abb. 6-25 auf einer Einheitsfläche schematisch für eine Mn-Bedeckung von $\Theta=0.5\text{ML}$ für ein Wachstum mit unterschiedlichen Nukleationsabständen (Faktor 10) dargestellt.⁽¹⁵⁾

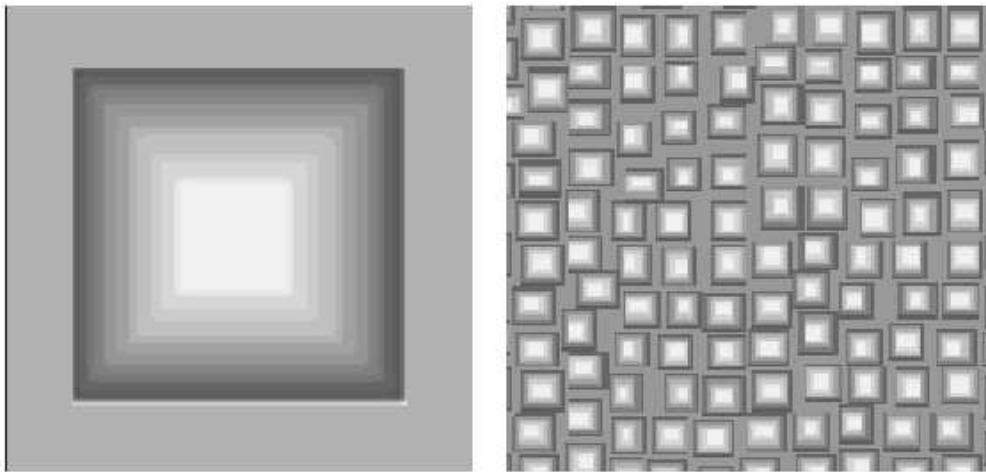


Abb. 6-25 Schematische Darstellung der Verteilung des Mn in den Inseln bei $\Theta=0.5\text{ML}$ für die gleiche Verteilung des Mn auf die oberste Substratlage und die Inseln aber unterschiedlichen Wachstumsmodi mit um eine Größenordnung verschiedenen Nukleationsabständen (dunklere Bereiche entsprechen einer erhöhten Mn-Konzentration)

Die Einführung von lagenweisen Interdiffusionsparametern zusammen mit der Konzentrationsabhängigkeit des Austausches von Fe und Mn in das Wachstumsmodell (Abschnitt 4.2) bildet dieses Verhalten ab und ermöglicht eine adäquate Beschreibung der Auger-Signale. Zur Veranschaulichung sind in der Abb. 6-26 die Bedeckungen und Konzentrationen aus dem Ergebnis bester Übereinstimmung zwischen Protonen- bzw. Elektronen-induziertem Auger-Signal mit dem Modell (vgl. Abb. 6-27) veranschaulicht. Neben der Gegenüberstellung des Mn und insgesamt offenem bzw. bereits bedecktem Anteil in den Einzel-Lagen macht besonders der entsprechende Konzentrationsverlauf die Inhomogenität der Mn-Verteilung sichtbar. So liegt die Mn-Konzentration in der obersten Substrat-Lage zu jedem Zeitpunkt im unbedeckten Bereich deutlich über der des bedeckten Bereiches. In der ersten Film-Lage findet sich wie erwartet zunächst kaum Mn und mit zunehmender Bedeckung wird der Konzentrationsunterschied zwischen bereits abgedeckten und noch offenen Bereichen größer. Erst in der zweiten Filmlage wird der Konzentrationsgradient infolge ca. 70..80% Mn-Anteil bei deutlich einsetzender Inselbildung auf etwa 90% bei abgeschlossener Bedeckung vernachlässigbar.

Neben den Inhomogenitäten erhält man im abgeschlossenen Film ein etwas verändertes Gesamtprofil der Mn-Konzentration von $c_{-1}\approx 20\%$, $c_0\approx 30\%$, $c_1\approx 60\%$, $c_2\approx 90\%$ und $c_{3,4,\dots}\approx 100\%$. Die Entwicklung der gemessenen Auger-Signale wird mit diesem Modell, das sowohl das nichtideale Lagenwachstum wie auch die konzentrationsabhängige Interdiffusion mit entsprechenden inhomogenen Verteilungen von Substrat und Adsorbat innerhalb der Grenzflächen-Lagen berücksichtigt, zufriedenstellend reproduziert.

¹⁵ Der Einfluß eines solchen Wachstums- / Interdiffusionsverhalten im Zusammenhang mit der Größe der Adsorbat-Inseln ist insbesondere für die Interpretation der magnetischen Eigenschaften des Systems (Abschnitt 7.4) von Bedeutung

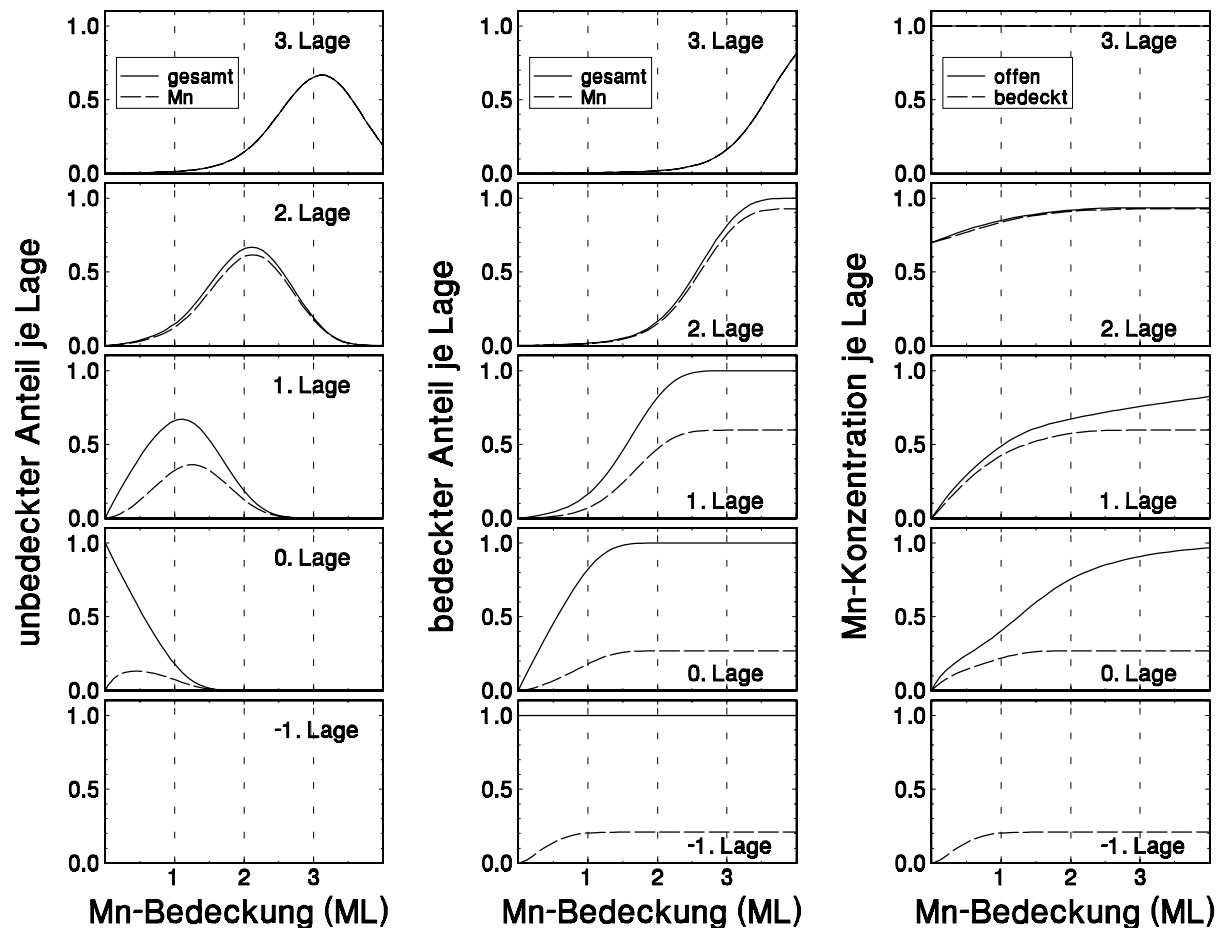


Abb. 6-26 Entwicklung der lagenweisen Zusammensetzung beim transient lagenweisen Wachstum von Mn/Fe(100) bei $T=600\pm 20\text{K}$ unter Einbeziehung konzentrationsabhängiger Interdiffusion (entsprechende Auger-Signale siehe Abb. 6-27).

Modell / Auger-Anregung	c_{-1}	c_0	c_1	c_2	c_3
ideales Lagenwachstum, Konzentration statisch / H^+	0.0	0.6 ± 0.1	0.5 ± 0.1	0.9 ± 0.1	1.0
ideales Lagenwachstum, Konzentration statisch / e^-	0.0	0.6 ± 0.2	0.3 ± 0.2	1.0	1.0
transientes Wachstum, Konzentration statisch / H^+	0.0	0.6 ± 0.1	0.4 ± 0.1	1.0	1.0
transientes Wachstum, Konzentration statisch / e^-	0.0	0.6 ± 0.2	0.4 ± 0.2	1.0	1.0
transientes Wachstum, Konzentration dynamisch während des Wachstums / H^+ und e^-	0.2 ± 0.1	0.3 ± 0.1	0.6 ± 0.1	0.9 ± 0.1	1.0

Tabelle 6-1 Zusammenfassung der Ergebnisse zur Konzentration von Mn im Bereich der Grenzfläche Mn/Fe(100) entsprechend der verschiedenen Modelle (siehe Text).

Zusammenfassend ist festzustellen, daß man beim Wachstum von Mn bei ca. 600K mit dem Wechsel von etwa 50% des deponierten Mn in das Substrat auch unter die Substrat-Oberfläche eine etwas stärkere Interdiffusion an der Grenzfläche zum Fe(100) vorfindet, als beim Wachstum der Cr-Filme. Dies steht in guter Übereinstimmung mit Dichtefunktional-Rechnungen von Nonas *et al.* [NWZ98]. Das gleichzeitige Auftreten inhomogener Verteilungen von Mn und Fe innerhalb der Grenzflächen-Lagen kann sich auf das magnetische Kopplungsverhalten auswirken, das stark von der lokalen Umgebung der Einzelatome abhängt (siehe Abschnitt 7.4).

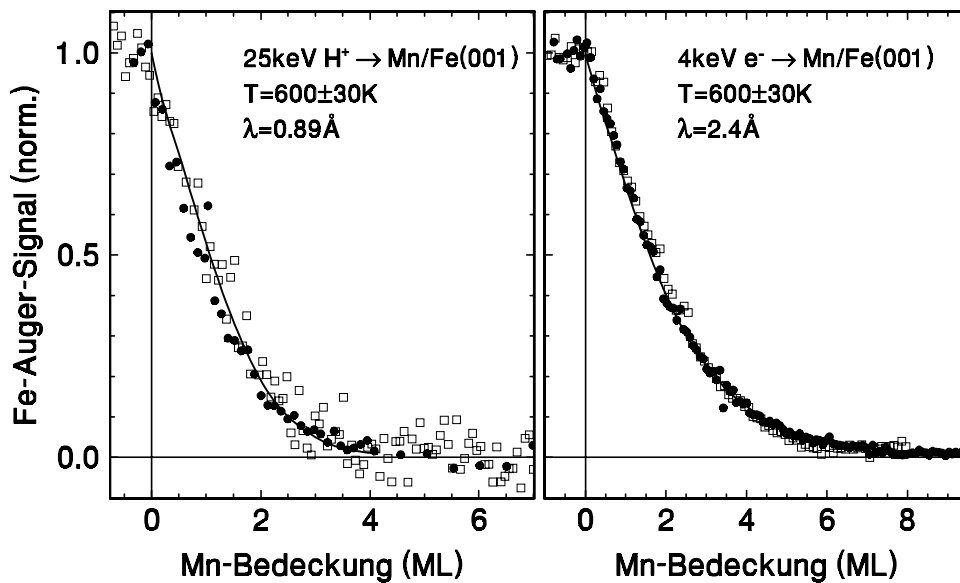


Abb. 6-27 Verlauf der Fe- $M_{23}VV$ -Auger-Signale beim Wachstum von Mn auf Fe(100) bei $T=600\pm20K$ nach Anregung mit 25keV- H^+ mit $\Phi_{in}\approx1.5^\circ$, $\lambda=0.89\text{\AA}$ (a) und 4keV- e^- , $\lambda=2.4\text{\AA}$ (b) entsprechend der Ergebnisse aus dem Modell mit dynamischer Konzentrationsänderung.

6.4 V-FILME AUF FE(100)

Vanadium - ein 3d-Paramagnet mit bcc-Gitter - wurde als Film auf Fe(100) in den vergangenen Jahren zunächst als ein weiterer Kandidat für interessante Kopplungsphänomene neben Cr und Mn hinsichtlich der magnetischen Eigenschaften untersucht (siehe Abschnitt 7.5). Dabei wurde dem Filmwachstum und somit der Struktur des Films bzw. der Grenzfläche nur unwesentliche Aufmerksamkeit gewidmet. Begleitende experimentelle Untersuchungen beschränkten sich hier auf die Kontrolle des 1x1-LEED-Beugungsbildes [WH94, FTL96, FBH98] oder den exponentiellen Signal-Verlauf der hochenergetischen L_3VV -Auger-Linien von V (473eV) und Fe (703eV) zur Bestimmung der Filmdicke [FTL96] und favorisieren ein lagenweises Wachstum. Kürzliche Untersuchungen mit RHEED und winkelabhängiger Auger-Spektroskopie – ebenfalls an den hochenergetischen L_3VV -Linien – [BAA98, HAA98] widersprechen sich in ihren Aussagen zum Wachstumsmodus und zeigen keine Anhaltspunkte für die Diffusion von Vanadium in das Fe-Volumen zwischen 300 und 700K. Theoretische Studien hingegen prognostizieren die Interdiffusion von V und Fe an der Fe(100)-Grenzfläche mit nahezu dem gleichen Energiegewinn wie im System Cr/Fe(100) [NWZ98]

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Wachstum der V-Filme auf Fe(100) wie bei den Fe-, Cr- und Mn-Filmen mit der streifenden Ionenstreuung und der Elektronen-induzierten Auger-Spektroskopie im Bereich der niederenergetischen $M_{23}VV$ -Linien (20..70eV) charakterisiert. Exemplarisch sind in der Abb. 6-28 die Intensitätssoszillationen der Streuung von 25keV He^+ ($\Phi_{in}=1.75^\circ$) beim Wachstum der ersten V-Lagen auf Fe(100) für zwei verschiedene Temperaturen gezeigt. Der beobachtete Verlauf des Streusignals ist den Ergebnissen vom Wachstum der Mn-Filme ähnlich:

Bei niedriger Temperatur liegt kaum ausgeprägtes Lagenwachstum vor. Die schnell abfallende Intensität der lagenweisen Maxima zeigt die nur schwache Ausbildung der einzelnen Monolagen unter rascher Zunahme der Oberflächen-Rauhigkeit an. Mit zunehmender Temperatur wird zwar die erste Monolage besser ausgebildet, aber bereits ab der zweiten Lage findet man auch hier kein lagenweises Wachstum mehr vor. Aus dem schnellen Verschwinden der Oszillationen ist das gleichzeitige Wachstum in mehreren Lagen abzulesen. Die einzelnen Prozesse der Nukleation, Aggregation und Koaleszenz eines lagenweisen Wachstums können nicht mehr identifiziert werden.

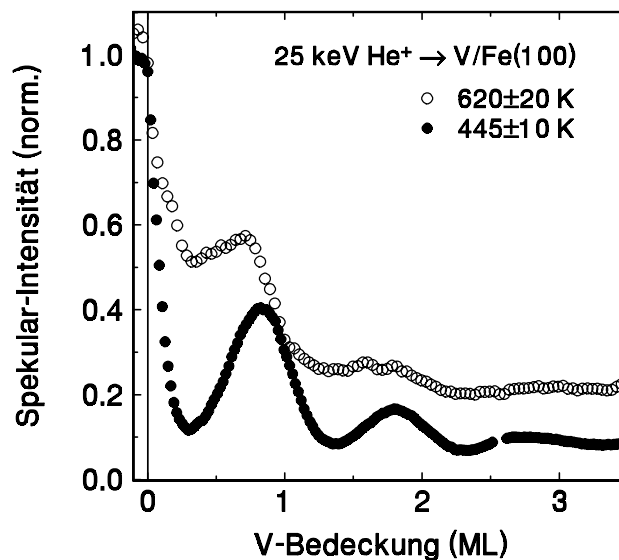


Abb. 6-28 Spekulare Streuausbeute von 25keV He⁺ ($\Phi_{in}=1.75^\circ$) beim Wachstum von V/Fe(100) für $T=445\pm10\text{K}$ und $F=3.5\times10^{-3}\text{MLs}^{-1}$ (geschlossene Symbole) und $T=620\pm20\text{K}$ (offene Symbole) bei einer Depositionsrate von $1\times10^{-2}\text{MLs}^{-1}$

Das frühzeitige Einsetzen des dreidimensionalen Wachstums kann unter anderem der gegenüber den Mn-Filmen weiter vergrößerten Verspannung des Films durch die Gitterfehlانpassung von ca. 5.6% zugeschrieben werden.

In Analogie zu den Systemen Cr/Fe(100) und Mn/Fe(100) ergibt die quantitative Analyse der Intensitätsminima bei Bedeckungen um 0.5ML durch den Vergleich mit den entsprechenden Computersimulationen (Abschnitt 4.1) für die erste V-Lage mittlere Nukleationsabstände von $L=25\pm10\text{\AA}$ bei ca. 450K und $L=250\pm30\text{\AA}$ bei ca. 620K. Unter Berücksichtigung der hier etwas geringeren Depositionsraten von $F\leq1\times10^{-2}\text{MLs}^{-1}$ ergeben sich für V/Fe(100) nur unwesentlich kleinere Nukleationsabstände gegenüber Mn/Fe(100). Auch die Abschätzung des Füllungsgrades der ersten atomaren Lage des Vanadium-Films aus Höhe und Position des ersten Intensitätsmaximums bei einer nominellen Gesamtbedeckung mit einer Monolage liefert Werte um 80%.

Folglich ist das Wachstum der ersten Monolage V/Fe(100) aus morphologischer Sicht dem System Mn/Fe(100) sehr ähnlich. Der Übergang zum stationären Wachstum unter Beteiligung mehrerer Lagen erfolgt bei den V-Filmen jedoch bereits ab der zweiten Monolage.

Zur Beurteilung der Interdiffusionseigenschaften von V/Fe(100) wurden die Auger-Signale der niederenergetischen $M_{23}\text{VV}$ -Linien von V(31eV) und Fe(47eV) nach

Anregung mit 4keV-Elektronen während des Filmwachstums aufgenommen. Für diese Messungen stand gegenüber den Cr- und Mn-Filmen nur ein Elektronenspektrometer mit einem deutlich schlechteren Signal-Untergrund-Verhältnis zur Verfügung.⁽¹⁶⁾ Insbesondere auf die Auswertung von dicht am Ausläufer des Peaks inelastisch gestreuter Sekundärelektronen gelegenen Auger-Linien wirkt sich das negativ aus. Die in den Protonen-induzierten Auger-Messungen erhaltenen Signal-Größen waren deshalb für eine quantitative Auswertung nicht ausreichend. Das geringe Auger-Signal und das vergleichsweise schlechte Lagenwachstum lassen daher eine nur näherungsweise Bestimmung des Konzentrationsprofils zu.

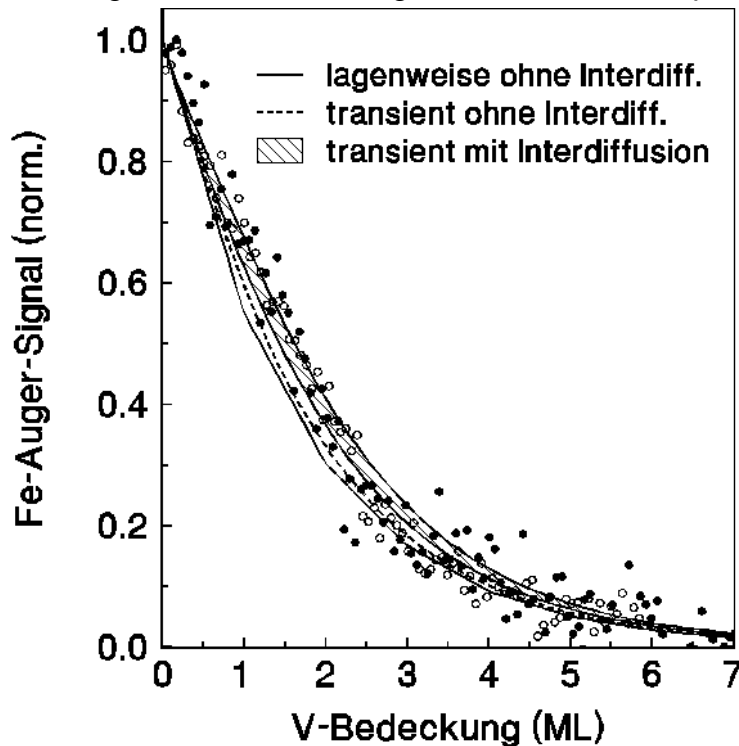


Abb. 6-29 Verlauf des 4keV-Elektronen-induzierten Fe-M₂₃VV-Auger-Signals beim Wachstum von V/Fe(100) bei T=370±10K (geschlossene Symbole) bzw. T=620±20K (offene Symbole). Zum Vergleich sind die berechneten Abhängigkeiten des Auger-Signals für das ideale Lagenwachstum (durchgezogene Linie) und für das transient lagenweise Wachstum ohne (gestrichelte Linie) und mit Interdiffusion (schraffierter Bereich) gezeigt (vgl. Abb. 6-30).

Für die Auswertung der Auger-Spektren wurden wie beim System Mn/Fe(100) die elementspezifischen Auger-Signale an der sauberen Fe-Oberfläche bzw. einem mehrlagigen V-Film ($\Theta \geq 7\text{ML}$) durch Untergrundabzug ermittelt. Durch den vernachlässigbaren Überlapp der beiden niederenergetischen M₂₃VV-Linien von V und Fe kann der Untergrund im Bereich der Fe-Linie aus dem Spektrum vom dicken V-Film recht genau bestimmt werden. Deutlich ungünstiger ist die Untergrund-Bestimmung im Bereich der V-Linie, da die Lage im Ausläufer des niederenergetischen Sekundär-Elektronen-Peaks dazu führt, daß sich hier die Intensität während des

¹⁶ Für die Messungen am System V/Fe kam der Zylinder-Segment-Energieanalysator mit einem Add-on-Channeltron der Fa. OMICRON zum Einsatz, das im vorliegenden Aufbau primär für die spinpolarisierte Elektronenspektroskopie konzipiert und für die Auger-Spektroskopie nur beschränkt nutzbar ist.

Filmwachstums mit der Rauigkeit deutlich ändert.⁽¹⁷⁾ Die Bestimmung der partiellen Element-Signale im Gesamtspektrum während des Filmwachstums liefert folglich nur für die $M_{23}V\text{-Fe}$ -Linie reproduzierbare Ergebnisse. Für die quantitative Auswertung des Signalverlaufs wurde ein Interlagenabstand von 1.43\AA [HAA98] und aufgrund der Ähnlichkeit mit dem Mn/Fe auch die bereits dort ermittelte Informationstiefe von $\lambda=2.4\pm0.3\text{\AA}$ sowie das gleiche Wachstumsmodell zur Lagenfüllung (vgl. Abschnitt 6.3.2) angewendet.

Der Verlauf der Fe-Auger-Signale für $T=370\pm10\text{K}$ bzw. $T=620\pm20\text{K}$ ist in der Abb. 6-29 gezeigt. Wird die Interdiffusion des Vanadium in das Fe-Substrat ausgeschlossen, liegen die experimentellen Auger-Intensitäten im Bereich der ersten Monolagen wiederum deutlich über dem berechneten Signalverlauf - sowohl für das reine Lagenwachstum als auch für das transiente Lagenwachstum. Dies zeigt, daß auch beim $V/Fe(100)$ eine Grenzflächen-Interdiffusion stattfindet. Die Variation der Interdiffusionswahrscheinlichkeiten im Wachstumsmodell ab der obersten Substratlage und der Vergleich mit den experimentellen Daten liefert eine Abschätzung des Konzentrationsprofils. Da für das Wachstum von $V/Fe(100)$ keine Vergleichsmessungen mit veränderter Informationstiefe zur Verfügung stehen, sind die zu ermittelnden Konzentrationen noch stärker an das entsprechende Modell gekoppelt. Deshalb wurden in der Auswertung leicht variierende Wachstumsmodi wie auch unterschiedliche Diffusionsgradienten angewendet und deren Resultate miteinander verglichen. Der Bereich des so ermittelten theoretischen Signalverlaufs ist durch die schraffierte Fläche in der Abb. 6-29 dargestellt. Da sich das Wachstum bei den unterschiedlichen Temperaturen bezüglich der Lagen-Füllung kaum unterscheidet und das Modell die Verteilung der Inseln nicht explizit berücksichtigt, ändert sich auch die Zusammensetzung der einzelnen Lagen entsprechend dem fast identischen Signalverlauf nicht wesentlich.⁽¹⁸⁾ Man kommt zu dem Ergebnis, daß die Interdiffusion wie beim System $Cr/Fe(100)$ im wesentlichen auf die oberste Substrat-Lage des $Fe(100)$ und die erste Film-Lage begrenzt ist. Das wird durch die aus dem Wachstumsmodell ermittelten Verläufe der Gesamt- und Vanadium-Anteile der einzelnen Lagen im Bereich der Grenzfläche deutlich, die analog zum System $Mn/Fe(100)$ entsprechend dem schraffierten Bereich der Abb. 6-29 in der Abb. 6-30 dargestellt sind. Die wesentlichen Merkmale bestehen also im überwiegenden Wechsel von V und Fe zwischen den Grenzflächenlagen, so daß hier eine V-Endkonzentration von $c_0\approx25\%$ in der obersten Substratlage und $c_1\approx70\%$ in der ersten Film-Lage erreicht wird, sowie einer geringen Diffusion des Vanadium auch in die erste vergrabene Substratlage. Bereits ab der zweiten Monolage wächst der Film mit $c_2\approx90\text{..}100\%$ und $c_3=100\%$ als nahezu reiner Vanadium-Film weiter auf.

Man findet also im Rahmen der Unsicherheiten ähnliche Verhältnisse der Interdiffusionseigenschaften zum System $Mn/Fe(100)$ und $Cr/Fe(100)$, aber mit einem geringeren Interdiffusionsgrad. Dieses Verhalten steht wiederum in guter Übereinstimmung mit den theoretischen Berechnungen von Nonas *et al.* [NWZ98].

¹⁷ Im Bereich der Fe-Linie wurde bei der Ermittlung des Auger-Signals die Intensität des Untergrundes mit variiert. Die erhaltene Änderung der Untergrund-Intensität betrug dabei weniger als 5%.

¹⁸ Aufgrund der verschiedenen Nukleationsabstände führt ein vergleichbares Interdiffusionsprofil dennoch zu deutlich unterschiedlichen Verteilungen der einzelnen Atomsorten innerhalb der Lagen (siehe Abschnitt 7.4).

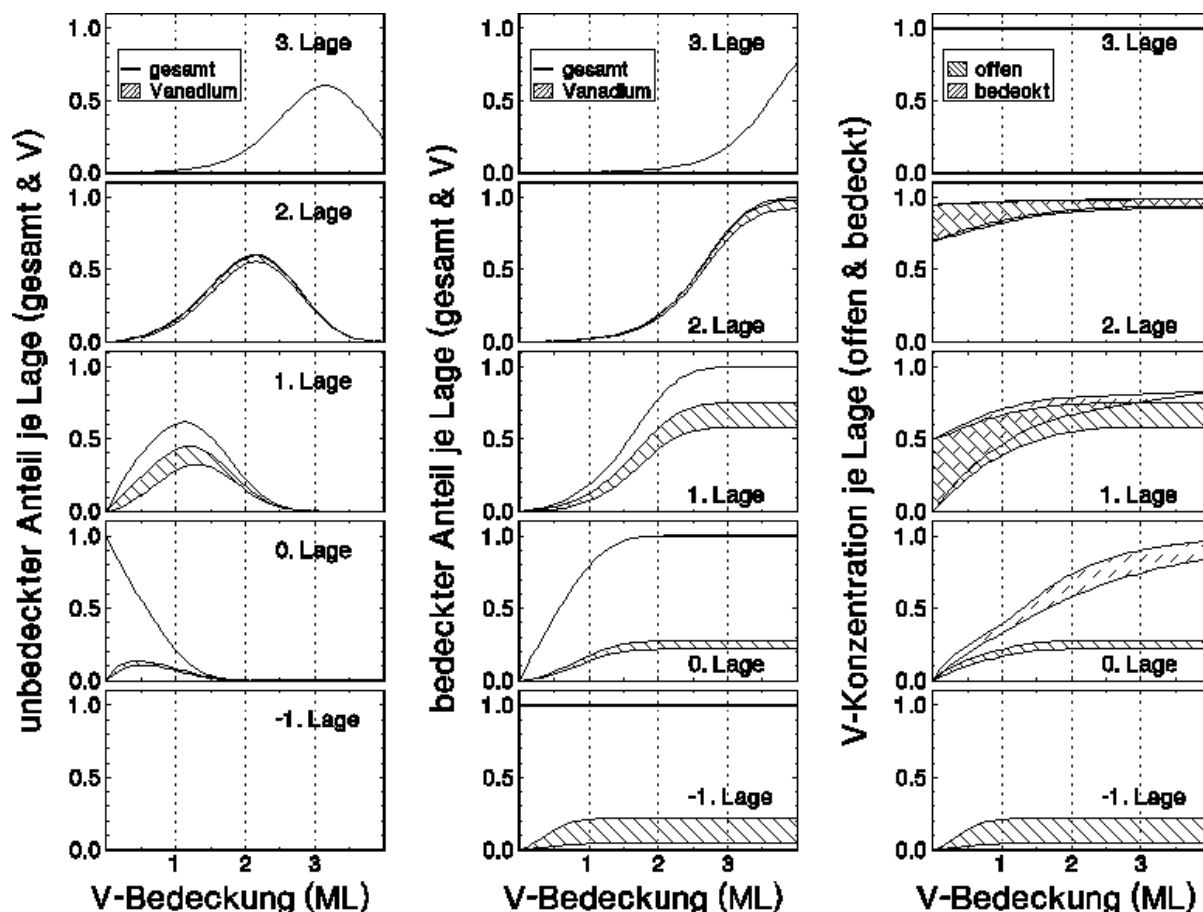


Abb. 6-30 Modell des Wachstums von V/Fe(100) bei $T \approx 370..620\text{K}$ als Ergebnis der Streumessungen und Auger-Daten (Abb. 6-29) unter Berücksichtigung der Interdiffusion. Die schraffierten Bereiche zeigen die V-Anteile bzw. in der rechten Spalte die V-Konzentration in offenen / abgedeckten Bereichen der einzelnen Monolagen entsprechend den Unsicherheiten im Modell.

6.5 AUSTRITTSARBEITEN

Beim Wachstum von Filmen können chemische und strukturelle Änderungen der Oberfläche die Austrittsarbeit beeinflussen [z.B. PGJ79, NSW95, JIH98]. Das hat entsprechend den Ausführungen im Abschnitt 5.2 Konsequenzen auf die elektronische Wechselwirkung und insbesondere den Elektroneneinfang bei der streifenden Ionen-Streuung an diesen Oberflächen.

Änderungen der Oberflächen-Morphologie beim homoepitaktischen Filmwachstum führen im Bereich eines zumindest transient lagenweisen Wachstums zu geringen Änderungen der Austrittsarbeit in der Größenordnung von 0.05eV [NSW95]. Deutlich größere Änderungen sind dagegen bei heteroepitaktischen Systemen zu Beginn des Wachstums zu erwarten, wenn sich Substrat und Adsorbat in den Austrittsarbeiten der entsprechenden Kristall-Oberflächen unterscheiden, wie das in den hier untersuchten Systemen der Fall ist. Dementsprechend wurden die verschiedenen Film-Systeme hinsichtlich einer möglichen Änderung der Austrittsarbeit analysiert.

In der Regel wurde die Austrittsarbeit von Substrat und nach Aufwachsen einer Monolage des jeweiligen Film-Materials durch Photoemission bestimmt. Das Prinzip

der Messung ist durch die Abb. 6-31 wiedergegeben. Der Austrittsspalt eines Spektrometers H10UV (Fa. Jobin-Ivon) mit einer Xe-Lampe XB075 als Lichtquelle wurde mittels einer Linse ($f=135\text{nm}$ bei $\lambda=250\text{nm}$) durch ein MgF-Fenster in der UHV-Kammer auf die Target-Oberfläche abgebildet. Der bei der Photoemission entstehende Targetstrom wurde als Funktion der Wellenlänge $I(\lambda)$ im Bereich von $\lambda=200..400\text{nm}$ aufgenommen. Um nur den tatsächlich von der Target-Oberfläche ausgehenden Emissionsstrom zu bestimmen, muß bei der Anordnung von Spektrometer und Target darauf geachtet werden, daß das vom Target reflektierte Licht nicht auf innere Metall-Oberflächen der UHV-Kammer trifft, sondern durch ein weiteres Fenster wieder austreten kann. Von dem so gemessenen Targetstrom war anschließend ein konstanter Untergrund (Leckstrom) abzuziehen, der aus der Messung oberhalb der Grenzwellenlänge $\lambda_G=\hbar/\Phi_A$ bestimmt wurde. Die mit einer kalibrierten Photodiode (Fa. Hamamatsu) bestimmte spektrale Intensitätsverteilung der Lichtquelle, bestehend aus Xe-Lampe, Spektrometer und Abbildungslinse, zusammen mit der ebenfalls vermessenen Transmissionsfunktion des MgF-Fensters lieferte die Korrekturfunktion, mit der der Photoemissionsstrom aus dem effektiven Targetstrom bestimmt wurde. Aus dem so korrigierten Photostrom $I(E=\hbar/\lambda)$ kann in der Nähe der Schwelle für die Photoemission die Austrittsarbeit Φ_A ermittelt werden.

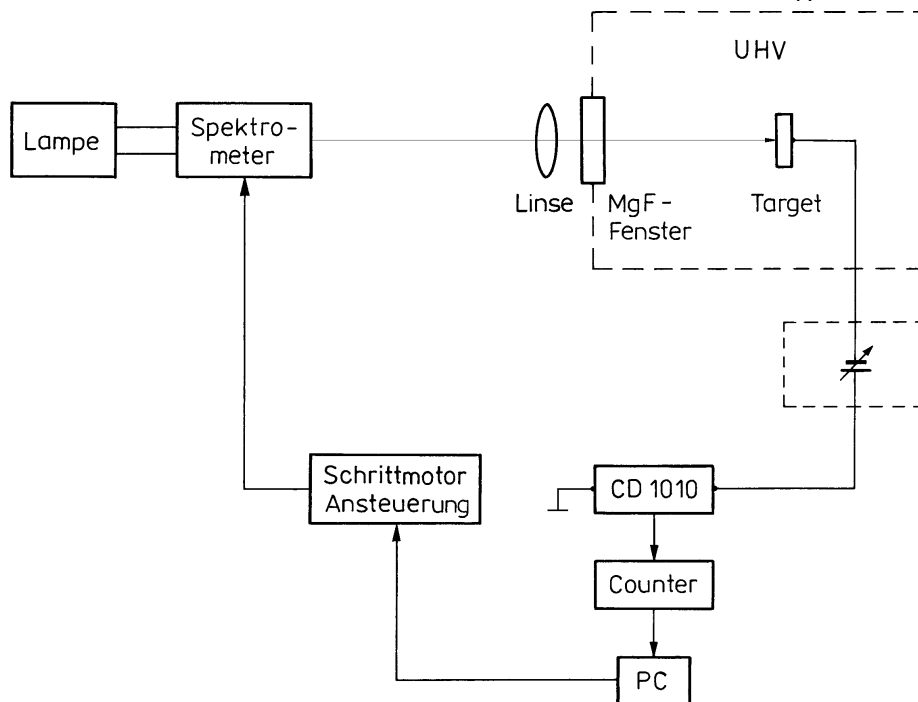


Abb. 6-31 Prinzipskizze zur *in situ* - Messung der Austrittsarbeit mittels Photoemission.

Der Zusammenhang zwischen der eingestellten Wellenlänge λ und dem in das Vakuum emittierten Elektronenstrom $I(\lambda, \Phi_A, T)$ läßt sich nach W. Fowler [FOW31] in der Form

$$I(\lambda, \Phi_A, T) \propto (kT)^2 F(\mu)$$

$$\text{mit } \mu = \frac{\hbar/\lambda - \Phi_A}{kT}, F(\mu) = \begin{cases} \frac{\pi^2}{6} + \frac{\mu^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \exp(-n\mu)}{n^2} & : \mu \geq 0 \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} \exp(n\mu)}{n^2} & : \mu < 0 \end{cases}$$

darstellen. Für metallische Oberflächen und Temperaturen um 300K genügt der Photostrom ins Vakuum nach F. Wooten *et al.* [WS69] jedoch in guter Näherung dem finiten Temperaturlimit ($T \rightarrow 0$) der Fowler'schen Formel

$$I(\lambda, \Phi_A) \propto (\hbar/\lambda - \Phi_A)^2.$$

Abweichungen von diesem einfachen Zusammenhang bei Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit liegen für die hier aufgenommenen Daten bei $T \sim 300..400\text{K}$ mit $\Delta\Phi_A \sim \pm 0.01\text{eV}$ [DUB31] deutlich unterhalb der Meßunsicherheit⁽¹⁹⁾ und sind für die zu bestimmende Änderung der Austrittsarbeit beim Filmwachstum unerheblich.

Zunächst wurde die saubere Fe(100)-Oberfläche untersucht. Dabei wurde sowohl die nach dem Abtrag mehrerer Monolagen durch Sputtern stark aufgeraute wie auch die unterschiedlich weit ausgeheilte Oberfläche (vgl. Abschnitt 5.1.2) wiederholt analysiert. Es zeigte sich, daß die Meßergebnisse zwar innerhalb eines Präparationszyklus reproduzierbar sind ($\Delta\Phi_A \approx \pm 0.03\text{eV}$), jedoch trotz vergleichbarer Oberflächenrauigkeiten und keiner meßbaren Kontamination in den Auger-Spektren nach erneuter Präparationen um nahezu $\pm 0.1\text{eV}$ voneinander abweichen können. Innerhalb des resultierenden Vertrauensbereiches der Austrittsarbeit konnte kein eindeutiger Unterschied zwischen der gesputterten und ausgeheilten Oberfläche festgestellt werden. Entsprechend wurde die Austrittsarbeit der Fe(100)-Oberfläche zu $\Phi_A = 4.4 \pm 0.1\text{eV}$ bestimmt (vgl. Abb. 6-32). Größe und Vertrauensbereich der Austrittsarbeit stimmen hier recht gut mit den Angaben aus anderen Arbeiten überein, die von 4.31eV [FOM66] bis 4.4eV [TCE82] reichen und nach Ohnishi *et al.* theoretisch bei 4.29eV liegt [OFW83].

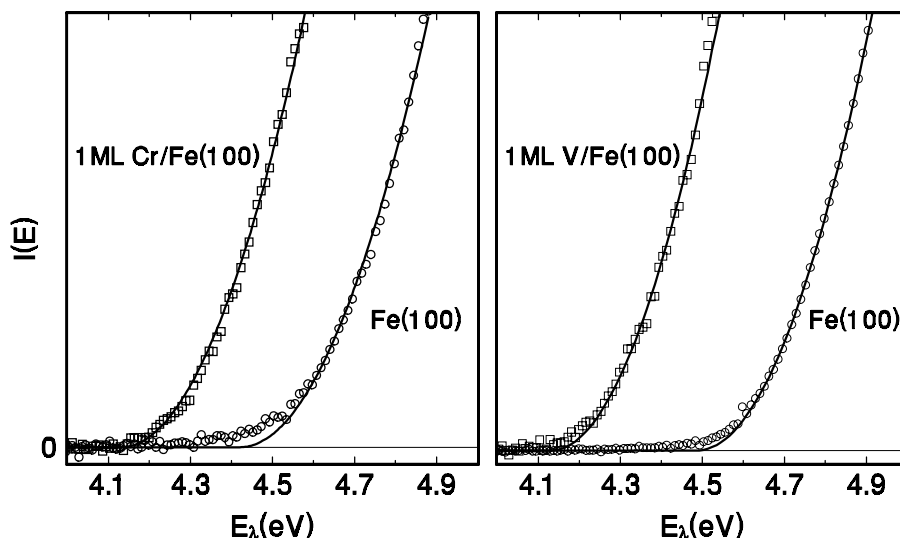


Abb. 6-32 Photostrom und Ergebnis des Fowler-Fits (siehe Text) zur Bestimmung der Austrittsarbeit an Fe(100) sowie nach Bedeckung mit einer Monolage Cr bzw. V.

Anschließend wurde unmittelbar nach der Vermessung der sauberen Fe(100)-Oberfläche eine Monolage des zu untersuchenden Films präpariert und die Austritts-arbeitsmessung wiederholt. In der Abb. 6-32 sind die Ergebnisse dieser Messungen für die vorpräparierte Fe(100)-Oberfläche sowie die mit einer Monolage Chrom bzw.

¹⁹ Bei der Auswertung der experimentellen Daten unter Anwendung der Fowler'schen Formel ergaben sich allein durch die Variation des unteren Einsatzpunktes für den Fit $I(E=\hbar/\lambda)$ um $\Delta E \sim \pm 0.1\text{eV}$ Unsicherheiten in der Austrittsarbeit von bis zu $\Delta\Phi_A \approx \pm 0.02\text{eV}$.

Vanadium bedeckte Oberfläche gezeigt. Man erkennt eine deutliche Verringerung der Austrittsarbeit für die heteroepitaktischen Systeme. Bei 1ML Cr/Fe(100) nimmt die Austrittsarbeit gegenüber dem sauberen Fe(100) um $\Delta\Phi_A=0.30\pm0.05\text{eV}$ ab. Dies bestätigt die Erwartung, wenn man davon ausgeht, daß die Austrittsarbeit für Cr(100) in früheren Arbeiten kleiner als für Fe(100) bestimmt worden ist (4.1eV nach Meier *et al.* [MPS82], 4.46eV nach Wilson *et al.* [WM83] und theoretisch 4.05eV nach Fu & Freeman [FF85]).

Auch bei der Bedeckung der Fe(100)-Oberfläche mit einer Monolage Vanadium beobachtet man entsprechend der Abb. 6-32 eine Verringerung der Austrittsarbeit um $\Delta\Phi_A=0.36\pm0.05\text{eV}$.

Ein alternativer Weg zur Ermittlung der Austrittsarbeit bzw. deren Änderung *in situ* und in Echtzeit unter Ausnutzung der Methode der streifenden Ionen-Streuung besteht in der Bestimmung des geschwindigkeitsabhängigen Verhältnisses von geladenen und neutralen Alkali-Atomen nach der Streuung.

Die Neutralisationsrate streifend gestreuter Ionen an der Festkörper-Oberfläche hängt von der aktuellen Lage des zu besetzenden atomaren Niveaus E_a im Abstand des Elektroneneinfangs y_s von der obersten Atomlage gegenüber den besetzten Festkörper-Zuständen ab und ist somit an die Austrittsarbeit gekoppelt. Verschiebt sich mit der Projektilgeschwindigkeit der atomare Zustand (vgl. Abb. 3-15), so ändert sich auch die Neutralisationsrate. Die Energiedifferenz $E_g(y_s)$ zwischen dem Fermi-Niveau und der aktuellen Lage des atomaren Zustands ($E_g(y_s)=\Phi_A-E_a(y_s)$) ist demnach ein Parameter für den Zusammenhang zwischen der Projektilgeschwindigkeit v und dem Neutral-Anteil P_0 im gestreuten Ionenstrahl. Sie kann nach [WIN91] in der Form

$$E_g(y_s) \approx v v_c \ln \left[\frac{g^+}{g^-} \left(\frac{1}{P_0} - 1 \right) \right] - \frac{v^2}{2}$$

dargestellt werden. Für den Elektroneneinfang bzw. -verlust bei der streifenden Na^+ -Streuung beträgt der Spinfaktor $g^+/g^-=2$ und es ist ein charakteristischer Geschwindigkeitsparameter in der Größenordnung von $v_c \approx 0.09..0.1 \text{a.u.}$ anzunehmen [ZNW90]. Neben der Möglichkeit, aus dem geschwindigkeitsabhängigen Neutralanteil über E_g direkt die Austrittsarbeit der Festkörper-Oberfläche zu bestimmen [BW96], genügt es zur Abschätzung der Austrittsarbeitsänderung beim Filmwachstum die entsprechende Änderung von E_g bei konstanter Geschwindigkeit zu ermitteln. Diese Methode wurde auf das System Mn/Fe(100) angewendet. Dazu wurde der Neutralanteil im Maximum der Streuverteilung nach der streifenden Streuung von Na^+ mit $E_0=15\text{keV}$ bzw. $E_0=20\text{keV}$ beim Wachstum des Mn-Films auf der Fe(100)-Oberfläche bestimmt. Die Meßergebnisse in der Abb. 6-33 zeigen, daß der Neutralanteil bis zu einer Bedeckung mit 1ML Mn gegenüber der sauberen Fe(100)-Oberfläche um ca. 50% zunimmt und anschließend entsprechend dem weiteren Wachstum des quasi reinen Mn-Films eine deutlich geringere Variation aufweist. Diese Ergebnisse führen für die Bedeckung von 1ML Mn/Fe(100) unter Berücksichtigung von $v_c \approx 0.09..0.1 \text{a.u.}$ auf eine Verringerung der Austrittsarbeit um $\Delta\Phi \approx 0.3 \pm 0.06 \text{eV}$ gegenüber Fe(100).

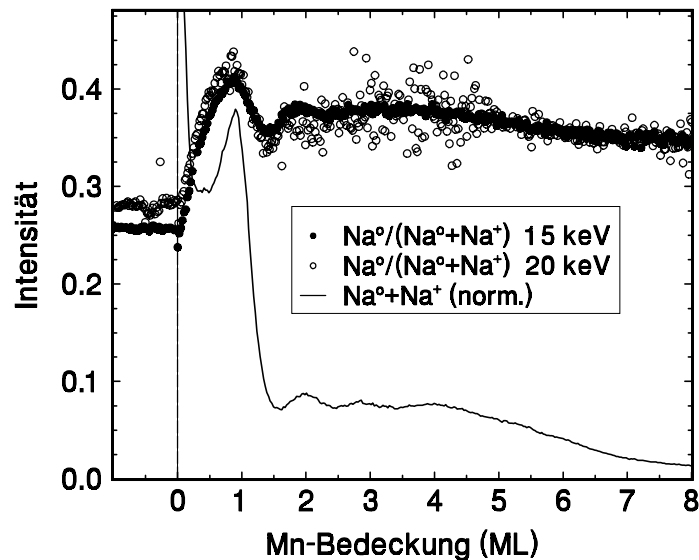


Abb. 6-33 Spekulare Streuenausbeute und Anteil neutralisierter Projektile im Spekularpeak bei der streifenden Streuung von Na^+ an Fe(100) ($E_0=15$ bzw. 20keV , $\Phi_{\text{in}}\approx 1.37^\circ$) während des Wachstums von Mn/Fe(100) bei $T\sim 570\text{K}$.

Zusammenfassend konnte mit unterschiedlichen Methoden gezeigt werden, daß für die untersuchten Systeme Cr/Fe(100), V/Fe(100) und Mn/Fe(100) eine Abnahme der Austrittsarbeit gegenüber dem unbedeckten Substrat in der Größenordnung von ca. 0.3eV zu verzeichnen ist. Die Abnahme aufgrund des heteroepitaktischen Wachstums fällt damit deutlich größer aus, als eine Variation nur durch veränderte Oberflächenmorphologien im Bereich von etwa 0.05eV [NSW95].

7 MAGNETISCHE EIGENSCHAFTEN DER FILME

Zum Studium der magnetischen Eigenschaften der auf dem Fe(100)-Substrat gewachsenen Übergangsmetallfilme wurde die streifende Ionenstreuung mit dem Einfang polarisierter Elektronen von der Metall-Oberfläche angewendet. Wie bereits im Abschnitt 5.2 dargestellt, kann die Spin-Polarisation der in die angeregten Projektilezustände eingefangenen Elektronen zum magnetischen Moment der Oberflächen-Atome in Beziehung gesetzt werden, wenn die experimentellen Parameter so gewählt wurden, daß alle besetzten Zustände der Oberfläche am Einfangprozeß beteiligt sind. Aufgrund der streifenden Streugeometrie und der damit verbundenen Ausdehnung der an der Wechselwirkung beteiligten Oberfläche beziehen sich die Meßergebnisse auf magnetische Gesamtmomente. Die Informationstiefe der Meßmethode ist auf die oberste Atomlage begrenzt. Ändert sich also beim Wachstum eines heteroepitaktischen Films durch Interdiffusion die chemische Zusammensetzung und damit möglicherweise das magnetische Moment in tieferen Lagen, so wird das nicht direkt detektiert. Die kontinuierliche Messung der Spin-Polarisation während des Filmwachstums gibt also stets das magnetische Gesamtmoment der offenen Oberfläche, die sich im allgemeinen über mehrere Lagen erstreckt, wieder. Entsprechend wird das Meßsignal neben den magnetischen Momenten vom Wachstumsmodus beeinflusst.

Die in dieser Arbeit studierten 3d-Übergangsmetalle V, Cr, Mn und Fe unterscheiden sich im Volumen sowohl in der Kristallstruktur als auch in der magnetischen Ordnung. Bei Raumtemperatur liegen V, Cr und Fe in der bcc-Struktur mit unterschiedlichen Gitterkonstanten vor, während Mn die kubische α -Phase annimmt [LB86]. Ganz verschieden sind die magnetischen Eigenschaften dieser Metalle: Fe ist unterhalb der Curie-Temperatur von $T_C=1043\text{K}$ ferromagnetisch. Mn und Cr haben eine antiferromagnetische Anordnung der magnetischen Momente. Beim Cr findet man unterhalb der Neel-Temperatur von $T_N=311\text{K}$ einen lagenweisen Antiferromagnetismus, wobei die Anordnung der magnetischen Momente durch eine nichtangepaßte Spindichtewelle beschrieben wird [FAW88, BH94a]. Das α -Mn zeigt bereits innerhalb der Einheitszelle nichtkollineare magnetische Momente. Schließlich weist V als Paramagnet keine spontane Ordnung der magnetischen Momente auf. Aufgrund der sehr unterschiedlichen magnetischen Eigenschaften der Metalle selbst und verschiedener Wachstumsmodi sind die untersuchten 3d-Übergangsfilm hinsichtlich ihrer magnetischen Kopplungseigenschaften zum Fe(100)-Substrat von Interesse. Die Anwendung des Einfangs polarisierter Elektronen bei der streifenden Ionenstreuung zur Untersuchung verschiedener magnetischer Oberflächen-Strukturen wird in den folgenden Abschnitten anhand der entsprechenden Filmsysteme demonstriert.

Die Polarisations-Messungen beim Wachstum der Metallfilme erlauben zum Teil auch Rückschlüsse auf die Filmstruktur und damit eine direkte Zuordnung zum Wachstumsstadium. Die entsprechenden Ergebnisse werden in den folgenden Abschnitten an geeigneter Stelle diskutiert und mit den Ergebnissen aus dem

vorherigen Kapitel verglichen.

7.1 Fe/Fe(100)

Das homoepitaktische System Fe/Fe(100) ist besonders geeignet, den Einfluß morphologischer Änderungen der Oberfläche auf die Messung der magnetischen Eigenschaften zu prüfen, da hier insbesondere das magnetische Oberflächen-Moment konstant ist – sofern ein Einfluß von Fremd-Adsorbaten zu vernachlässigen ist. Die hier erhaltenen Ergebnisse dienen also als Referenz für die Untersuchungen an heteroepitaktischen Systemen.

Zunächst wurde die Fe(100)-Oberfläche sorgfältig präpariert und durch die Aufnahme der spekularen Streuverteilung (vgl. Abschnitt 5.1) und mittels Auger-Spektroskopie charakterisiert. Die mittlere Terrassenbreite der präparierten Oberfläche betrug deutlich über 1000Å und Oberflächen-Kontaminationen waren nicht feststellbar. Auf diese Oberfläche wurde ein Fe-Film bei $T=470\pm 15\text{K}$ mit einer Rate von $F\sim 1.8\times 10^{-3}\text{MLs}^{-1}$ aufgewachsen, um eine möglichst deutliche Änderung der Morphologie zu erreichen (siehe Abschnitt 6.1 und Abb. 6-5). Die entsprechenden Ergebnisse aus der Messung zum Einfang polarisierter Elektronen in den $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand bei der streifenden Ionenstreuung sind in der Abb. 7-1 wiedergegeben.⁽²⁰⁾

Zunächst ist festzustellen, daß die Lichtintensität aus dem Zerfall des angeregten atomaren Zustandes zu Beginn des Filmwachstums ansteigt. Dies spiegelt die Zunahme harter Stöße bei der Streuung aufgrund der zunehmenden Stufendichte beim Filmwachstum wider, bei denen die Anregungswahrscheinlichkeit des detektierten atomaren Zustandes zunimmt (vgl. Abschnitt 5.2). Oberhalb der Bedeckung etwa einer halben Monolage fällt die Variation der Lichtintensität deutlich geringer aus, da sich unter den hier eingestellten Wachstumsbedingungen auch die mittlere Stufendichte nur noch wenig ändert. Aus der Abhängigkeit der Anregungswahrscheinlichkeit und somit der Intensität des Fluoreszenzlichts von der mittleren Stufendichte ergibt sich zusätzlich die Möglichkeit, bei geschickter Auswahl des detektierten Streuwinkelbereiches und einem Filmwachstum mit deutlich wechselnder mittlerer Stufendichte zwischen halb und ganz gefüllten Monolagen analog der Messung der spekularen Streuintensität aus der Fluoreszenz-Intensität auf die Bedeckung zu schließen. Damit kann das Polarisationsignal ohne zusätzliche Messungen der aktuellen Bedeckung zugeordnet werden.

Im Gegensatz zur Fluoreszenzintensität ändert sich die Spin-Polarisation im Rahmen der Meßgenauigkeit während des Wachstums nicht, womit unter der Voraussetzung eines unveränderten magnetischen Moments der Fe-Oberfläche die Unabhängigkeit der Spin-Polarisations-Messung am $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand bei der streifenden Streuung von 25keV He^+ von der Oberflächen-Morphologie nachgewiesen wird. Dieses Ergebnis steht in guter Übereinstimmung mit dem Befund der Unabhängigkeit der gemessenen Spin-Polarisation bei der Variation des Einfallswinkels an der sauberen Fe(100)-Oberfläche im Abschnitt 5.2.

²⁰ Bei diesen Messungen wurde mit der Abschattungsblende lediglich gegen mögliches Streulicht von der Target-Oberfläche abgeschattet, um den Einfluß der veränderten Streubedingungen (Großwinkelstreuung) aufgrund der veränderten Oberflächen-Morphologie beim Filmwachstum zu studieren.

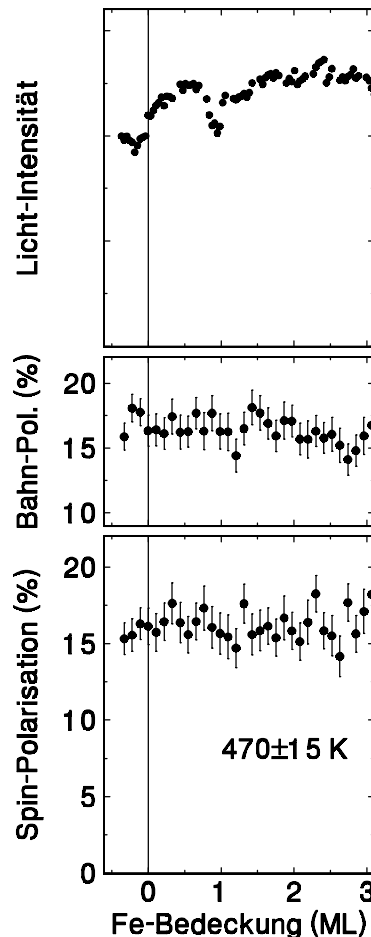


Abb. 7-1 Ergebnisse der Polarisationsmessungen beim Einfang polarisierter Elektronen in den $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand bei der streifenden Streuung von 25keV He^+ ($\Phi_{\text{in}} \sim 1.5^\circ$) beim Wachstum von $\text{Fe}/\text{Fe}(100)$.

Die gemessene Bahn-Polarisation zeigt ebenfalls keine Abhängigkeit von der Oberflächen-Morphologie des Fe-Films an. Demnach ist der Einfluß der Oberflächen-Rauhigkeit auf die Bahn-Polarisation unter den hier verwendeten experimentellen Bedingungen vernachlässigbar.

Die Experimente zum Einfang polarisierter Elektronen in den $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand bei der streifenden Streuung von 25keV He^+ am System $\text{Fe}/\text{Fe}(100)$ zeigen also deutlich, daß die Oberflächen-Morphologie epitaktisch gewachsener Filme unter o.g. Bedingungen keinen Einfluß auf die gemessene Spin-Polarisation und Bahn-Polarisation hat, sondern lediglich die Gesamtintensität des Fluoreszenzlichts von der mittleren Stufendichte der Oberfläche abhängt und damit eine Bestimmung der Filmdicke ermöglicht.

7.2 DAS MODELLSYSTEM $\text{Fe}/\text{Cr}/\text{Fe}(100)$

Das Sandwich-System $\text{Fe}/\text{Cr}/\text{Fe}(100)$ ist ein in den letzten Jahren häufig mit unterschiedlichsten Methoden hinsichtlich der magnetischen Kopplung untersuchtes Schichtsystem [GSP86, HB94, FGB95, HCM00]. Inzwischen hat sich ein konsistentes Bild über die magnetische Kopplung der Fe-Deckschicht zum $\text{Fe}(100)$ -

Substrat in Abhängigkeit der Cr-Zwischenschichtdicke ergeben. So findet man für Cr-Schichten zwischen ca. 4 und 11 ML eine antiferromagnetische Kopplung des Fe-Films zum Substrat. Oberhalb etwa 10 Monolagen Cr-Zwischenschichtdicke ist die magnetische Kopplung von der Qualität der Filme abhängig [PSU94, HCM99]. So findet man in der Regel einen Wechsel zwischen antiferromagnetischer und ferromagnetischer Kopplung mit einer Periode von ca. 10 Cr-Monolagen [PMR90, UCP91]. Unter idealen Wachstumsbedingungen der Schichten auf einem Fe(100)-Whisker haben Unguris *et al.* [UCP91] mittels Raster-Elektronen-Mikroskopie mit Polarisationsanalyse (SEMPA) und Heinrich *et al.* [HCM99] mittels Brillouin-Lichtstreuung oberhalb etwa 10 Monolagen Cr-Zwischenschichtdicke auch eine Oszillationsperiode der magnetischen Kopplung von zwei Monolagen gefunden, die an die Spindichtewelle im Cr gebunden ist [SLF92, BC98, FS99]. Dies ist in der Abb. 7-2 schematisch angedeutet und durch die SEMPA-Meßergebnisse belegt (in verschiedenen Domänen oben und unten zeigt der Kontrastunterschied den Wechsel der Kopplungsrichtung an).

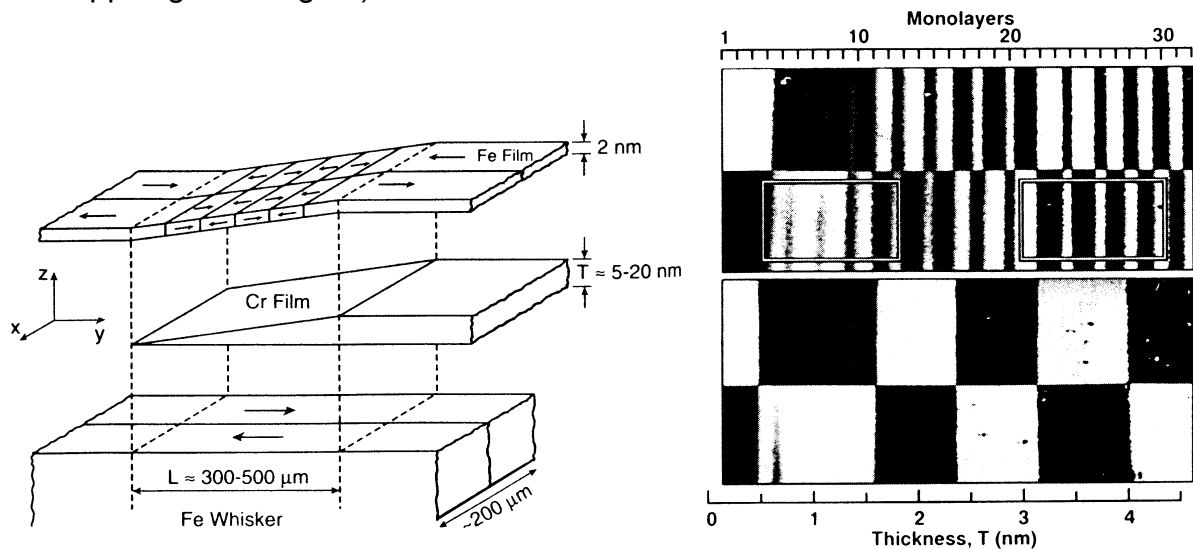


Abb. 7-2 Schematische Darstellung der Proben-Struktur (links) sowie SEMPA-Bild der M_y -Magnetisierung (rechts) am System Fe/Cr/Fe(100), bei dem von Unguris *et al.* ein keilförmiger Cr-Film auf einem Fe-Whisker mit Hilfe einer beweglichen Blende präpariert wurde. In der rechten Abbildung zeigt der Kontrast die unterschiedlichen Magnetisierungsrichtungen der Fe-Deckschicht an. Die beiden Teilaufnahmen rechts unterscheiden sich durch die Präparation bei verschiedenen Wachstumstemperaturen von ca. 600K (oben) und ca. 300K (unten). (aus [UCP91])

Das System Fe/Cr/Fe(100) wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit mit verschiedenen Cr-Zwischenschichtdicken präpariert und mit dem Einfang polarisierter Elektronen bei der streifenden Ionenstreuung (25keV-He^+ , $\Phi_{\text{in}}=1.7^\circ$) analysiert. Da hier mit Gesamt-Filmdicken von 20 und mehr Monolagen für die Analyse einer einzigen Cr-Zwischenschichtdicke gearbeitet werden muß und deren Präparation wie auch Abtragung vor einer neuen Messung sehr aufwendig sind, wurden nur einige Messungen mit 7..8ML bzw. 12..15ML dicken Cr-Schichten durchgeführt⁽²¹⁾.

²¹ Sowohl Unguris *et al.* [UCP91] als auch Heinrich *et al.* [HCM99] finden für Cr-Zwischenschichtdicken von 6 und 7 ML eine antiferromagnetische Kopplung und für 12 Monolagen Cr eine ferromagnetische Kopplung der Fe-Deckschicht zum Fe-Substrat (Whisker) mit anschließendem lagenweisen Wechsel der Kopplungsrichtung.

Die Ergebnisse in der Abb. 7-3 zeigen eine positive Spin-Polarisation für die unbedeckte Fe(100)-Oberfläche. Bei einer Cr-Zwischenschicht von 7 bzw. 8 Monolagen wird die antiferromagnetische Kopplung der Fe-Deckschicht zum Substrat durch die negative Spin-Polarisation nachgewiesen.

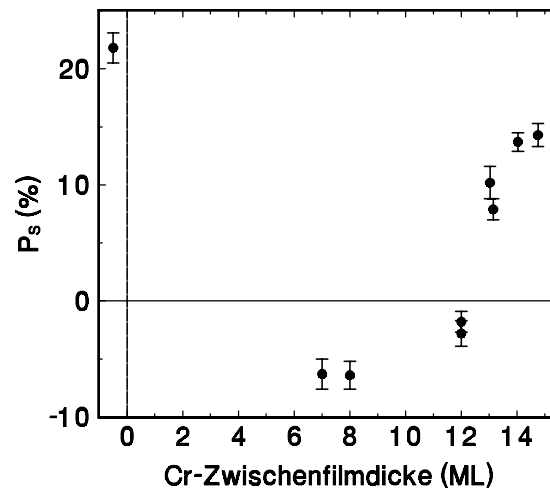


Abb. 7-3 Spin-Polarisation des $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustandes nach der Streuung von 25keV-He^+ ($\Phi_{\text{in}}=1.7^\circ$) am System Fe/Cr/Fe(100) mit unterschiedlichen Cr-Zwischenschichtdicken, gemessen nach Abkühlen auf ca. 300K.

Im Bereich einer Cr-Zwischenschichtdicke von etwa 12 Monolagen wechselt die Spin-Polarisation wieder ihr Vorzeichen und bleibt auch für die folgenden Cr-Schichtdicken positiv. Obgleich die Präparation des Schichtsystems zur Erlangung einer möglichst guten Filmqualität auf verschiedene Weisen für gleiche Cr-Schichtdicken erfolgte⁽²²⁾ und die gleichzeitig beobachtete spekulare Streuenausbeute streifend gestreuter 25keV-He^0 -Projektilen durch Oszillationen auf hohem Niveau ein gutes Lagenwachstum anzeigen, konnte mit dem Einfang polarisierter Elektronen in keinem Fall der lagenweise Wechsel der Fe-Fe-Kopplung für die untersuchten Cr-Zwischenschichtdicken beobachtet werden. Statt dessen entsprechen die hier erhaltenen Ergebnisse dem Verlauf der magnetischen Momente bei Auftreten der langen Oszillationsperiode.

Da das Mehrlagensystem Fe/Cr/Fe(100) kein zentraler Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit, die Präparation dieser Schichtsysteme auf dem stets wiederzuverwendenden Fe(100)-Einkristall sehr aufwendig und die lagenweise Oszillation der magnetischen Kopplung der Fe-Deckschicht an das Substrat nach Heinrich *et al.* [HCM99] nur selten zu beobachten ist, wurde auf weitere entsprechende Studien verzichtet.

Das zentrale Ergebnis der Messungen am Fe/Cr/Fe(100) als eines der am häufigsten untersuchten Schichtsysteme bezüglich der magnetischen Kopplungseigenschaften ist die Beobachtung der positiven bzw. negativen Spin-Polarisation nach dem Einfang polarisierter Elektronen bei der streifenden Ionenstreuung entsprechend der ferromagnetischen bzw. antiferromagnetischen Kopplung der Fe-Deckschicht an das

²² Einerseits wurde die gesamte Cr-Zwischenschicht bei gleichmäßig hoher Temperatur von ca. 600K aufgedampft und andererseits, so wie bei Heinrich *et al.* [HCM99] beschrieben, die ersten Cr-Lagen bei ca. 400K und anschließend die restlichen Cr-Lagen bei ca. 600K mit einer Rate von ca. 1MLmin^{-1} präpariert. Die mindestens sechs Monolagen dicke Fe-Deckschicht wurde bei ca. 450K und ebenfalls etwa 1MLmin^{-1} aufgedampft.

Substrat. Dies ist eine Bestätigung für die Funktionalität dieser Meßmethode zur Untersuchung magnetischer Oberflächenmomente.

7.3 Cr/Fe(100)

Die Variation der beobachteten magnetischen Kopplungen im Sandwich-System Fe/Cr/Fe(100) sowie die Entdeckung einer lagenweisen antiferromagnetischen Ordnung mehrere Monolagen dicker Cr-Filme auf Fe(100)-Whiskern [UCP92] führte in den vergangenen Jahren zu einer Vielzahl von Studien am System Cr/Fe(100). Insbesondere stand die Frage nach der magnetischen Kopplung im Bereich der ersten Cr-Monolagen, bei denen im System Fe/Cr/Fe noch keine lagenweise antiferromagnetische Ordnung nachgewiesen werden konnte. Diese Studien, sowohl theoretischer als auch experimenteller Natur, führten zu sehr unterschiedlichen und teilweise widersprüchlichen Ergebnissen.

So finden Pierce *et al.* [PCU93] mittels Sekundär-Elektronen-Mikroskopie mit Polarisations-Analyse (SEMPA) unter Idealbedingungen an Cr/Fe(100)-Whiskern ab etwa 5ML Cr zwar eine lagenweise antiferromagnetische Kopplung der Cr-Schichten entsprechend der Spindichtewelle im Cr-Volumen, im Bereich der ersten Monolagen ist dagegen fast keine Polarisation zu beobachten. Auch die Phase der oszillierenden Kopplung ist gegenüber theoretischen Erwartungen um eine halbe Periode verschoben. Erschwerend für die Analyse des Cr-Signals ist hier der hohe Untergrund von Sekundärelektronen aus tieferen Lagen aufgrund der Signaltiefe von ca. 5ML. Turtur und Bayreuther [TB94] stellen mittels *in situ* Magnetometer-Messungen die antiferromagnetische Kopplung zwischen Cr und Fe(100) an der Grenzfläche heraus, wobei sie aus der starken Signalabnahme auf ein erhöhtes magnetisches Moment in der ersten Cr-Lage schließen, wie es auf der Grundlage von Bandstrukturrechnungen vorhergesagt wurde [z.B. VF85, FFO85]. Die magnetische Ordnung der aufeinander folgenden Cr-Lagen wird hier zwar modellhaft betrachtet, ist aber fest an das idealisierte lagenweise Filmwachstum gekoppelt. Die Einbeziehung des transienten Lagenwachstum bei $T \approx 300\text{K}$ und der Grenzflächen-Interdiffusion ergäbe hier eine neue Interpretation der magnetischen Kopplung aus dem stetig abfallenden Meßsignal. Auch mit der spinpolarisierten Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie finden Hopster *et al.* [WPH92] bei 470K Wachstumstemperatur die antiferromagnetische Kopplung von Cr/Fe(100) an der Grenzfläche. Das Extremum der gemessenen Asymmetrie bei 1.9eV Energieverlust im Bereich der ersten Cr-Lage fällt dabei in verschiedenen Messungen unterschiedlich stark aus und der Vorzeichenwechsel wird nicht immer beobachtet. Im Verlauf des weiteren Wachstums zeigt die Asymmetrie das gleiche Vorzeichen wie die saubere Fe(100)-Oberfläche und geht ab etwa 8 Monolagen Cr-Bedeckung in eine schwache Oszillation um Null über, wobei deren Phase entgegengesetzt zu den SEMPA-Messungen von Pierce *et al.* liegt. Ganz ähnliche Ergebnisse lieferten die Untersuchungen von Landolt *et al.* [FPT96] bei ca. 300K Wachstumstemperatur mittels Energie-aufgelöster und spinpolarisierter Sekundär-Elektronen-Spektroskopie bei $E_{\text{kin}} < 3\text{eV}$ bzw. $E_{\text{kin}} = 47\text{eV}$. Auch hier erhalten die Autoren nach einem exponentiellen Untergrundabzug aufgrund der mehrlagigen Signaltiefe und unter Einbeziehung spinabhängiger Streuquerschnitte ein Profil der lagenweisen

Magnetisierung, das eine antiferromagnetische Kopplung der ersten Cr-Lage an das Fe(100)-Substrat und eine ferromagnetische Kopplung der zweiten bis etwa 10. Lage des Cr-Films mit abnehmender Stärke favorisiert.

Einige Widersprüche zwischen den experimentellen Ergebnissen und theoretischen Betrachtungen konnten inzwischen darauf zurückgeführt werden, daß in früheren Studien einerseits die morphologische Struktur, insbesondere der bei niedrigen Temperaturen gewachsenen Filme, und andererseits die Interdiffusion von Cr und Fe an der Grenzfläche unberücksichtigt blieb [z.B. WPH92, ITL93, VBD96]. Stoeffler *et al.* [SVD95] zeigten inzwischen, daß die experimentell beobachtete Phase der magnetischen Kopplung bei dicken Cr-Filmen auf diese Grenzflächen-Interdiffusion zurückgeführt werden kann. In weiteren Untersuchungen fanden Freyss *et al.* [FSD97], daß Phase und Stärke der magnetischen Kopplung im Cr-Film auch vom Konzentrationsgradient an der Grenzfläche abhängen. Allein die theoretische Behandlung einer einzelnen Monolage Cr/Fe(100) mit unterschiedlichen Konzentrationsprofilen (geordnete wie auch ungeordnete Legierung) innerhalb der beiden obersten Atomlagen führen auf eine Vielzahl energetisch vergleichbarer Lösungen mit deutlich unterschiedlichen magnetischen Momenten für Cr und Fe in den einzelnen Lagen, die sowohl eine ferromagnetische als auch eine antiferromagnetische Kopplung beider Atomsorten zum Substrat einschließen [TWF98, TFW00]. Insbesondere bei einem Cr-Anteil von ca. 50% in der ersten Filmlage erhalten die Autoren instabile Lösungen mit unterschiedlichen Kopplungsrichtungen. Die Gesamtheit der theoretischen Betrachtungen zum System dünner Cr-Filme auf Fe(100) in Verbindung mit den experimentellen Daten zum Wachstum, sowohl aus morphologischer Sicht als auch hinsichtlich der Grenzflächen-Interdiffusion, zeigt, daß präzise Vorhersagen der magnetischen Struktur bisher außer Reichweite erscheinen. Auch die Extraktion magnetischer Oberflächenmomente aus Meßmethoden mit Signaltiefen von mehreren Monolagen ist an theoretische Modelle zur Untergrundsignalbehandlung gekoppelt, was eines der wesentlichen Probleme bei der Interpretation entsprechender Daten darstellt [POW01]. Dies zeigt die Notwendigkeit weiterer Untersuchungen zur Klärung der magnetischen Eigenschaften von Cr/Fe(100).

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das anfängliche Wachstum der Cr-Filme auf Fe(100) unter verschiedenen Wachstumsbedingungen mittels dem Einfang polarisierter Elektronen in angeregte Terme bei der streifenden Ionenstreuung studiert. Im Zusammenhang mit den ausführlichen Untersuchungen zur Struktur der Filme und dem daraus entwickelten Wachstumsmodell (vgl. Kap. 6) liefert die extreme Oberflächenempfindlichkeit der angewendeten Meßmethode ergänzende Einsichten in die magnetischen Eigenschaften dieses Systems.

Betrachtet man die Ergebnisse der Polarisationsmessungen bei der streifenden Ionen-Streuung (Abb. 7-4), so findet man im gesamten untersuchten Temperaturbereich zwischen 300K und 730K beim Einsetzen des Cr-Wachstums eine deutliche Änderung sowohl der Spin- als auch der Bahn-Polarisation.

Betrachtet man zunächst die Bahn-Polarisation, so findet man entgegen der unveränderten Polarisation im homoepitaktischen System Fe/Fe(100) zu Beginn des

Cr-Wachstums eine deutliche Zunahme bis zu einer nominellen Bedeckung von ca. einer Monolage. Nachfolgend ändert sich die Bahn-Polarisation im Falle weitestgehend geschlossener Monolagen ($T \geq 600\text{K}$) nur noch wenig, steigt aber für den offeneren Film ($T = 300\text{K}$) auch darüber hinaus noch beträchtlich an. Wie bereits im Abschnitt 5.2 erwähnt, ist dies durch die Änderung der Austrittsarbeit möglich, wenn die Fe(100)-Oberfläche durch eine Cr-Oberfläche abgelöst wird. Tatsächlich wurde eine Erniedrigung der Austrittsarbeit nach dem Wachstum einer Monolage Cr/Fe(100) gegenüber der präparierten Fe(100)-Oberfläche von $\Phi_{\text{A,Fe(100)}} = 4.4\text{eV}$ auf $\Phi_{\text{A,1MLCr/Fe(100)}} = 4.1\text{eV}$ nachgewiesen. Die beobachtete Zunahme der Bahn-Polarisation steht in guter Übereinstimmung mit entsprechenden Modellrechnungen des Elektroneneinfangs [ZB94, BOR99]. Wie bereits aus den Messungen am System Fe/Fe(100) geschlußfolgert, läßt sich auch hier anhand der vergleichbaren Zunahme der Bahn-Polarisation innerhalb der ersten Cr-Monolage bei 300K (zunehmende Rauigkeit durch transientes Wachstum) bzw. 730K (Step-Flow mit nahezu keiner Änderung der Morphologie) ein deutlicher Einfluß der Oberflächenrauigkeit ausschließen.

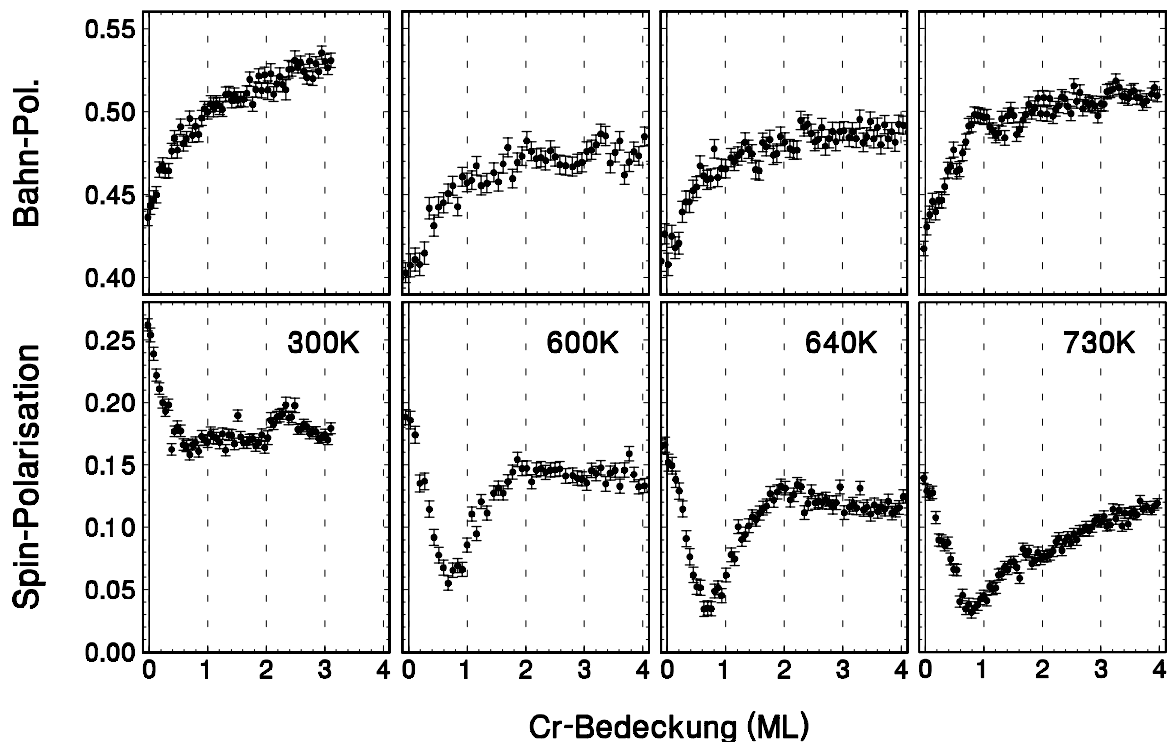


Abb. 7-4 Spin- und Bahn-Polarisation des $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustandes nach Streuung von 25keV He^+ ($\Phi_{\text{in}} \sim 1.7^\circ$) während des Wachstums von Cr/Fe(100) unter Variation der Wachstumstemperatur.

Die Spin-Polarisation zeigt zu Beginn des Cr-Wachstums zwischen 300 und 730K stets eine starke Abnahme vom temperaturabhängigen Ausgangswert (vgl. Abb. 5-18). Diese Abnahme weist zunächst auf eine massive Verringerung des magnetischen Gesamtmoments an der Oberfläche. Mit zunehmender Cr-Bedeckung gestaltet sich der Verlauf des Polarisations-Signals abhängig von der Temperatur etwas unterschiedlich, wie das aus den veränderten Wachstumseigenschaften zu erwarten ist.

Generell ist eine anfängliche Abnahme der Spin-Polarisation bis zu einer nominellen

Cr-Bedeckung von ca. 0.7 ML zu beobachten. Hier findet man je nach Qualität des Films bei schlechtem Lagenwachstum um 300K einen noch vergleichsweise hohen Polarisationsgrad ($>60\%$ des Ausgangswertes), der unter stetiger Verbesserung des Lagenwachstums weiter absinkt (ca. 35% bei 600K bzw. ca. 22% bei 640K) und mit dem Auftreten deutlich verstärkter Interdiffusion an der Grenzfläche wieder ansteigt (ca. 26% bei 730K)⁽²³⁾. Analog dazu ist ein anschließender Anstieg der Spin-Polarisation bis zu einer nominellen Cr-Bedeckung von etwa 2ML am deutlichsten im Bereich idealer Wachstumstemperaturen um 600..640K zu verzeichnen, die dort fast wieder das Ausgangsniveau der unbedeckten Fe-Oberfläche erreicht. Während diese Zunahme bei schlechtem Wachstum (300K) praktisch nicht auftritt, wird sie im stärker durchmischten Film (730K) zu größeren Cr-Bedeckungen hin "ausgeschmiert".

Oberhalb etwa 2ML nomineller Cr-Bedeckung findet man bei einem überwiegenden Cr-Anteil in der Oberflächenlage ($T \leq 640\text{K}$) stets eine nur langsam abnehmende positive Spin-Polarisation. Wie in der Abb. 7-5 ersichtlich, konnte selbst bei größeren Dicken des Cr-Films bis ca. 20ML keine oszillierende Spin-Polarisation gefunden werden. Statt dessen sind die Meßergebnisse hier mit einer ferromagnetischen Kopplung der Oberflächen-Lage des Cr bezüglich des Fe(100)-Substrats zu interpretieren.

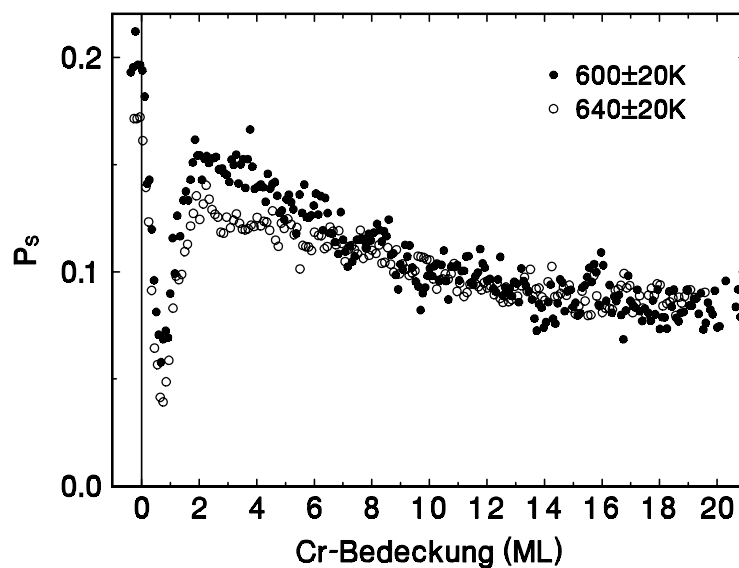


Abb. 7-5 Spin-Polarisation des $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustandes nach Streuung von 25keV He^+ ($\Phi_{\text{in}} \sim 1.7^\circ$) an Cr/Fe(100) für Filmdicken bis ca. 20ML bei lagenweisem Wachstum des Cr-Films (600K bzw. 640K).

Bereits ohne eine detaillierte Auswertung der Einzeldaten (Abb. 7-4) wird deutlich, daß sowohl die gemessene Spin-Polarisation als auch das magnetische Gesamtmoment innerhalb einer Lage insbesondere für die dünnen Cr-Filme von der spezifischen Struktur der Oberfläche abhängen. Folglich ist die Ermittlung der spezifischen magnetischen Momente an ein entsprechendes Wachstumsmodell gekoppelt, das

²³ Die Angaben für die Spin-Polarisation im Minimum sind als Mittelwert mehrerer Einzelmessungen bei gleicher Temperatur zu verstehen und dienen nur der Trend-Angabe. Bei konstanter Temperatur wurden dennoch sehr unterschiedlich stark ausgebildete Minima bei $\Theta_{\text{Cr}} \sim 0.7\text{ML}$ beobachtet. In einzelnen Messungen bei $T \sim 600\text{K}$ konnte zwischen etwa 0.7 und 0.8 ML Cr-Bedeckung auch eine negative Spin-Polarisation beobachtet werden.

sowohl die lagenweise Bedeckung als auch die chemische Zusammensetzung der Oberfläche berücksichtigt.

7.3.1 BERECHNUNG DER MAGNETISCHEN MOMENTE

Wie bereits im Abschnitt 5.2 erläutert, kann unter den angewendeten Meßbedingungen für den Einfang polarisierter Elektronen bei der streifenden Streuung von 25keV-He⁺ die Spin-Polarisation des HeI3³P-Zustandes näherungsweise proportional dem magnetischen Gesamtmoment der streuenden Oberfläche entlang der Beobachtungsrichtung angesehen werden. Aufgrund der Empfindlichkeit auf die oberste Atomlage ist am Verlauf der Spin-Polarisation über der Bedeckung $P_S(\Theta)$ die Änderung des magnetischen Gesamtmoments der aktuellen Oberfläche beim Filmwachstum direkt ablesbar. Da aber am Wachstumsprozeß in der Regel mehrere Lagen beteiligt sind und insbesondere in der Nähe der Grenzfläche durch die Interdiffusion verschiedene Atomsorten in die Oberfläche eingebettet sind, ist es für die Auswertung des Meßsignals bezüglich der Atomlagen und -sorten erforderlich, diese "streuende Oberfläche" möglichst naturgetreu zu modellieren. Das heißt, es ist zunächst die offene Fraktion der einzelnen Lagen und deren chemische Zusammensetzung zu approximieren. Aus der Anwendung des Wachstumsmodells mit Interdiffusion (Kap. 4.2) in Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus den Ionenstreuexperimenten zur Morphologie und den Auger-Ergebnissen (Kap. 6) lassen sich die geforderten Parameter leicht ermitteln.

Zur Abschätzung der atomaren magnetischen Momente im Grundzustand werden folgende Modell-Annahmen zugrundegelegt: (1) Die Spin-Polarisation ist der mittleren Polarisation der Leitungsband-Elektronen proportional. Das atomare Moment μ_i ergibt sich dann aus der Anzahl der Leitungsband-Elektronen je Atom (η_i) mit ihrer Polarisation $P_{S,i}$:

$$\mu_i = P_{S,i} \eta_i \mu_B.$$

(2) Die Zusammensetzung der offenen Oberfläche aus den einzelnen Lagen (n) entsprechend ihres unbedeckten Anteils $a_{O,n}$ führt mit den daraus resultierenden Polarisationen auf die Gesamtpolarisation

$$P_S = \sum_{n=0}^{\infty} a_{O,n} P_{S,n}, \quad \left(\sum a_{O,n} = 1 \right)$$

(3) Die von einer Lage n verursachte Polarisation $P_{S,n}$ wird von den beteiligten Atomsorten (i) entsprechend ihren Konzentrationen c_i im unbedeckten Bereich bestimmt:

$$P_{S,n} = \sum_i c_{i,n} P_{S,i}, \quad \left(\sum c_i = 1 \right)$$

Für das System Cr/Fe(100) ergibt sich demnach die gemessene Spin-Polarisation P_S aus den atomaren Momenten μ_i zu

$$P_S = \sum_{n=0}^{\infty} a_{O,n} \left(c_{Fe,n} \frac{\mu_{Fe}}{\eta_{Fe} \mu_B} + c_{Cr,n} \frac{\mu_{Cr}}{\eta_{Cr} \mu_B} \right).$$

(4) Trotz der Änderung der Konzentrationsverhältnisse während des Wachstums entsprechend dem Wachstumsmodell werden die atomaren Momente $\mu_{i,n}$ als kon-

stant angenommen.⁽²⁴⁾ Diese Annahme wird in der frühen Wachstumsphase davon gestützt, daß sich die verwendeten Konzentrationen $c_{i,n}$ in der unbedeckten Phase über größere Bereiche der Oberfläche nicht gravierend ändern (siehe Kap. 6) und somit die lokale Umgebung der Einzelatome näherungsweise erhalten bleibt. Darüber hinaus wird dabei die magnetische Wechselwirkung mit übernächsten Nachbarn im Fe-Cr-Gitter vernachlässigt [NWZ97, BLÜ98]. Die überwiegend isolierte Einbettung von Cr-Atomen in das Fe-Gitter zu Beginn des Wachstums wird experimentell durch STM-Studien [DSP97] bzw. durch theoretische *ab initio* LDFT-Rechnungen [NWZ98, WND98] gestützt, die für die eingebetteten Cr-Atome eine lokal (!) geordnete $c(2 \times 2)$ Legierung an der Oberfläche finden. Tatsächlich ist in der Realität im Verlauf des Wachstums einer Lage aufgrund der Änderung der Konzentrationsverhältnisse zwar mit einer Änderung der atomaren magnetischen Momente zu rechnen, da diese aber aus genannten Gründen als vernachlässigbar klein einzuschätzen ist und eine entsprechende Gesetzmäßigkeit nicht klar definiert werden kann, wird sie hier nicht berücksichtigt.

(5) Der thermischen Relaxation der magnetischen Momente wird entsprechend dem Temperaturverlauf der Spin-Polarisation Rechnung getragen (siehe Abb. 5-18).

Die auf dieser Grundlage berechneten magnetischen Momente für verschiedene Wachstums-Modi sind in der Abb. 7-6 für das Wachstum von Cr/Fe(100) bei $T=600 \pm 20\text{K}$ zusammengestellt. Für das Modell eines mittleren bis guten Lagenwachstums, das bei dieser Temperatur vorliegt, findet man übereinstimmend eine antiferromagnetische Kopplung des Cr nur in der obersten Substrat-Lage mit einem Moment von $\mu_{\text{Cr}0} \approx 1.5\mu_B$ vor. Von der ersten Film-Lage an koppelt das Cr in der Oberfläche ferromagnetisch mit $\mu_{\text{Cr}} \leq 2\mu_B$ zum Fe(100). Wie schon aus den Polarisations-Messungen an dickeren Filmen erkennbar war (Abb. 7-5), bleibt das Oberflächen-Moment vom Cr/Fe(100) auch für die folgenden Lagen positiv, verringert sich aber stetig mit zunehmender Filmdicke.

Für das Fe findet man in der obersten Substrat-Lage ein Moment von $2.3 \pm 0.1\mu_B$ in guter Übereinstimmung mit dem Volumenwert von $2.2\mu_B$ [DKS90]. In der ersten Filmlage kommt es in Auswertung der typischen Polarisationsmessungen zu einer antiferromagnetischen Kopplung des eingelagerten Fe sowohl zum Cr innerhalb der Lage wie auch zum Substrat ($\mu_{\text{Fe}1} \approx -1\mu_B$). Polarisationsmessungen mit verschwindender Spin-Polarisation bei $\Theta_{\text{Cr}} \approx 0.7\text{ML}$ führen hier sogar auf Fe-Momente um $-2.7\mu_B$ (offene Symbole in Abb. 7-6).

Alle Ergebnisse weisen darauf hin, daß die Nachbarschaft von Cr und Fe, bedingt durch die erhebliche Interdiffusion an der Grenzfläche, zu einer stark ausgeprägten antiferromagnetischen Kopplung führt, die sich nach den vorliegenden Daten sogar auf die Kopplungsrichtung des Fe in der ersten Filmlage auswirkt. Tatsächlich wird ein solches Resultat auch durch jüngere theoretische Arbeiten in Betracht gezogen, wie die Zusammenstellung der verschiedenen Ergebnisse von einem in zwei Lagen chemisch gänzlich unstrukturierten Film $\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}/\text{Cr}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}/\text{Fe}(100)$ in der Abb. 7-7 zeigt [TWF98].

²⁴ Die Ergebnisse aus frühen Untersuchungen von Turtur & Bayreuther [TB94], die auf der Grundlage einer idealen Grenzfläche eine deutliche Änderung (Reduktion) der magnetischen Momente von Fe und Cr zu Beginn des Wachstums nahelegten, können nach heutigen Erkenntnissen auch durch das nichtideale Wachstum des Films und speziell die dabei auftretende Grenzflächen-Interdiffusion erklärt werden.

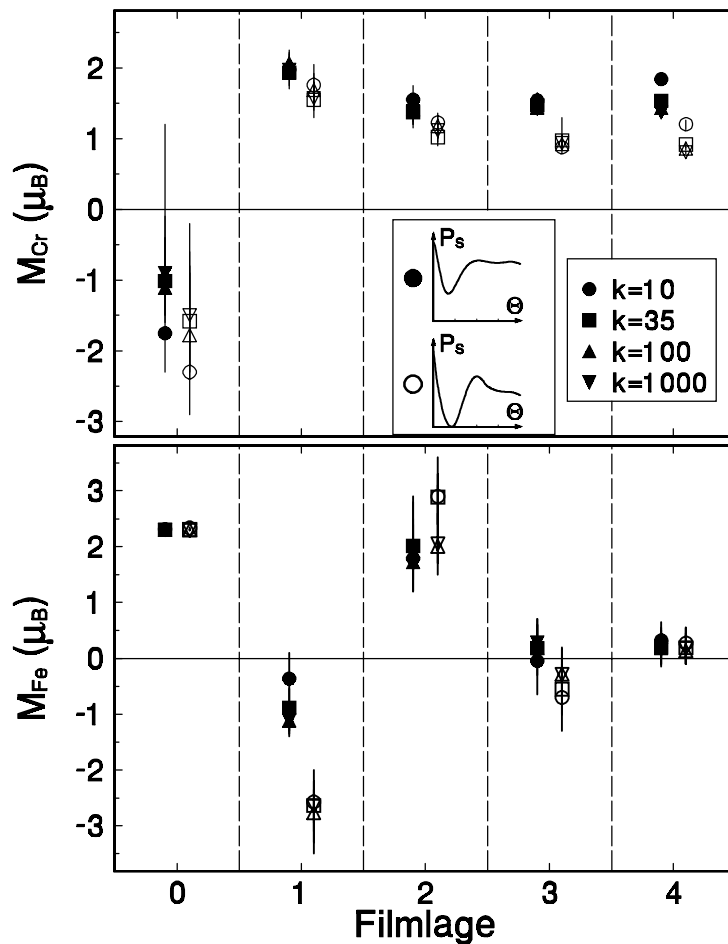


Abb. 7-6 Berechnete magnetische Momente für Cr und Fe in der obersten Substratlage (0) und den ersten Filmlagen (1..3) für das Wachstum von Cr/Fe(100) bei $T=600\pm 20K$. Es wurden verschiedene Wachstums-Modi entsprechend dem Modell aus Abschnitt 4.2 mit variierendem Transportparameter k und entsprechendem Füllungsgrad f der ersten Monolage angewendet ($k=10 / f=0.78$, $k=35 / f=0.88$, $k=100 / f=0.925$ und $k=1000 / f=0.975$). Die offenen bzw. geschlossenen Symbole beziehen sich auf den in der Legende jeweils dargestellten Verlauf der Spin-Polarisation.

Das noch in die Oberfläche der zweiten Lage diffundierte Fe zeigt wieder ein deutliches positives Moment von $\mu_{Fe2} \approx 2\mu_B$. In den folgenden Lagen ist der verschwindende Fe-Anteil für das Gesamtmoment nicht mehr relevant, was sich in der Rechnung durch das verschwindende Fe-Moment ab der dritten Lage ausdrückt. Das Ergebnis für den Verlauf der Spin-Polarisation mit den ermittelten Momenten ist in der Abb. 7-8 im Vergleich mit den entsprechenden Meßwerten veranschaulicht und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit diesen.

Für das Film-Wachstum bei deutlich höheren Temperaturen im Regime des Step-Flow ist das bisher verwendete Wachstumsmodell nicht mehr anwendbar, da in diesem Modell die Terrassenstruktur der Substratoberfläche lediglich als Randbedingung eingeht⁽²⁵⁾ und der wesentliche Wachstumsprozeß die Nukleation und Inselbildung voraussetzt.

²⁵ (mittlere Terrassenbreite des Substrats \gg mittlerer Nukleationsabstand) ist eine Randbedingung für Vernachlässigbarkeit der Morphologie im verwendeten Wachstums-Modell

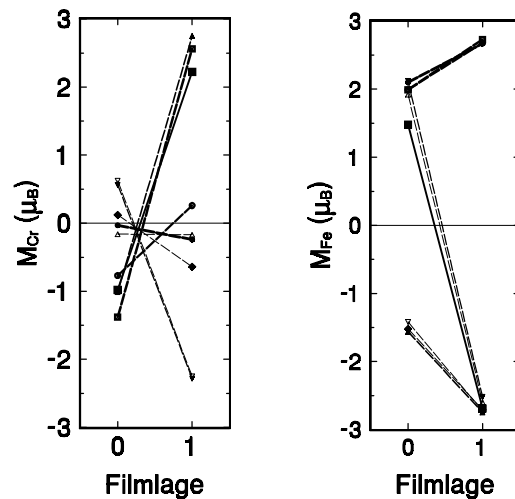


Abb. 7-7 Darstellung der verschiedenen stabilen Lösungen von TB-LMTO-Rechnungen von Turek *et al.* [TWF98] für die magnetischen Momente von Cr und Fe in einem abgeschlossenen Film, in dem das deponierte Cr (1ML) völlig ungeordnet auf die obersten beiden Lagen verteilt ist. Die Stärke der Verbindungslinie zusammengehöriger Werte nimmt mit zunehmender Gesamt-Energie des Systems ab.

Im Step-Flow-Regime wird dagegen aufgrund der deutlich erhöhten mittleren Diffusionslängen der Adatome die Größe und Verteilung der Terrassen mitbestimmend für den Bedeckungsgrad einzelner Terrassen. Dennoch kann man sich den veränderten Verlauf der Spin-Polarisation gegenüber dem Verlauf bei $T \approx 600..640\text{K}$ mit qualitativen Argumenten erklären: Da bei 730K zwar eine etwas höhere Interdiffusion von Cr und Fe während des Wachstums an der Grenzfläche zu erwarten ist, aber noch keine Eindiffusion des Cr in das Volumen stattfindet [PIW97c], sind prinzipiell ähnliche lokale Ordnungen der beteiligten Atomsorten in der obersten Substratlage und der ersten Adsorbatlage zu erwarten. Zusätzlich wird ein erhöhter Fe-Anteil in der Oberfläche jetzt auch bei größeren Schichtdicken wahrscheinlich.

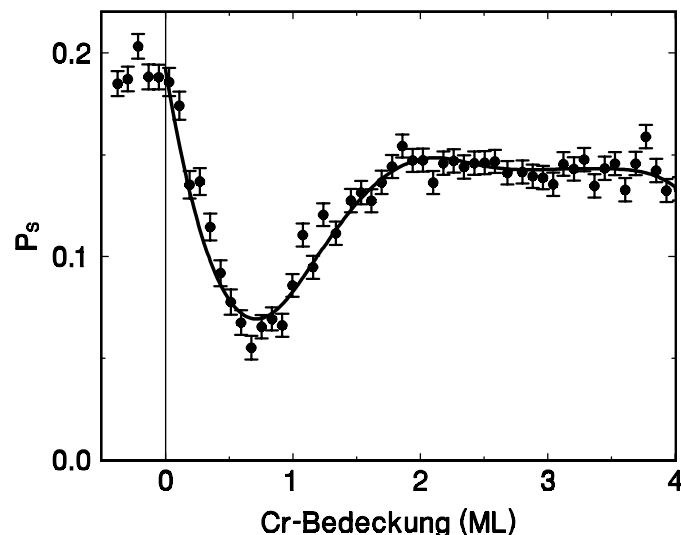


Abb. 7-8 Vergleich von Meßdaten und Modell-Rechnung der Spin-Polarisation zur Ermittlung der magnetischen Momente in der Oberfläche von Cr/Fe(100) bei $T=600 \pm 20\text{K}$.

Dies trägt aufgrund der zuvor gefundenen antiferromagnetischen Kopplung von Cr und Fe innerhalb einer Lage sowohl zu der beobachteten "Ausschmierung" der resul-

tierenden Spin-Polarisation zu größeren Bedeckungen als auch zur Dämpfung ihrer Variation im Bereich der ersten Film-Lagen bei (vgl. Abb. 7-4).

7.3.2 ERGEBNISSE ANDERER MESSMETHODEN

Die Ergebnisse zur magnetischen Kopplung von Cr/Fe(100) aus dem vorangegangenen Abschnitt stellen eine neue Variante gegenüber den verschiedenen Interpretationen zahlreicher früherer Experimente mit unterschiedlichen Methoden dar, die primär eine lagenweise antiferromagnetische Kopplung des Cr bei nahezu unverändertem Fe-Moment vertreten [WPH92, PCU93, TB94]. Wie bereits erwähnt, spielen jedoch das transiente Wachstum und die Grenzflächen-Interdiffusion eine Schlüsselrolle bei der Interpretation der experimentellen Daten. Angesichts dessen kann man davon ausgehen, daß sich die ermittelten magnetischen Momente insbesondere auf das hier entwickelte Wachstumsmodell mit Interdiffusion auf der Basis der Wachstumsuntersuchungen (Kap. 6) gründen. Zur Verifizierung der Meßmethode erscheint deshalb ein Vergleich mit den Ergebnissen anderer Methoden sinnvoll. Die Voraussetzung für die Vergleichbarkeit verschiedener Methoden ist aber eine analoge Informationstiefe. Die von Hopster *et al.* [WPH92] angewendete spinpolarisierte Sekundär-Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie (SPEELS) bei einer geringen Primärenergie der anregenden Elektronen (31.5eV) besitzt eine Informationstiefe von etwa einer Monolage. Der Verlauf der gemessenen Asymmetrie bei der Polarisation der Sekundärelektronen bei 1.9eV Energieverlust stimmt erstaunlich gut mit den in dieser Arbeit erhaltenen Ergebnissen der Spin-Polarisation überein (vgl. Abb. 7-9). Selbst die unterschiedlich starke Ausprägung des Minimums bei $\Theta \sim 0.7\text{ML}$ Cr/Fe(100) wird hier gefunden. Die Interpretation dieser Ergebnisse mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Wachstumsmodell würde demnach auf eine ähnliche magnetische Struktur zu Beginn des Wachstums von Cr/Fe(100) führen.

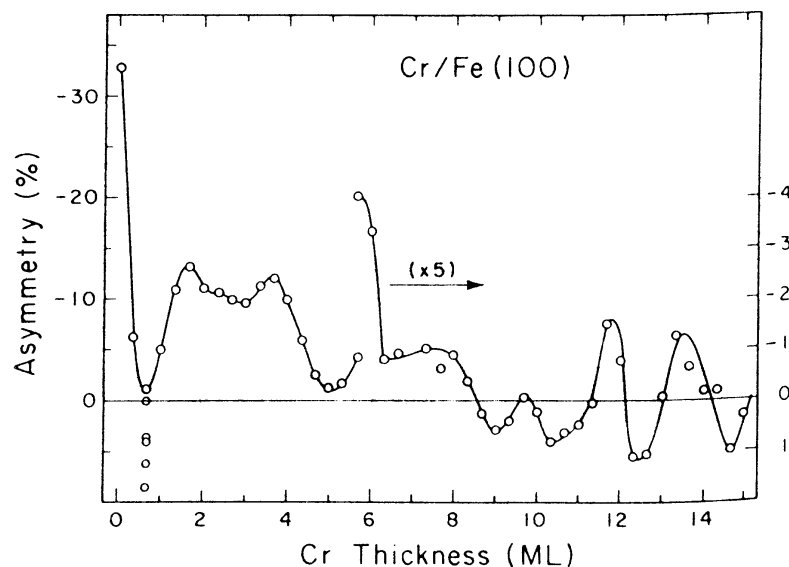


Abb. 7-9 Asymmetrie von Sekundärelektronen mit $E_{\text{prim}}=31.5\text{eV}$ und $\Delta E \sim 1.9\text{eV}$ Energieverlust von Cr/Fe(100). (aus [WPH92])

Eine weitere Bestätigung erfahren die Ergebnisse aus den vorherigen Abschnitten durch die Messung der Spin-Polarisation von niederenergetischen Sekundär-

Elektronen ($E_e \sim 0..20\text{eV}$), die parallel zu den Experimenten mit dem Einfang polarisierter Elektronen bei der streifenden Streuung in der gleichen UHV-Kammer von R. Pfandzelter durchgeführt wurden [POW01]: Die Sekundärelektronen wurden hier analog den Experimenten zur Auger-Spektroskopie sowohl durch höherenergetische Primär-Elektronen ($E_p=4\text{keV}$, $\Phi_{in} \sim 33^\circ$) als auch durch streifend gestreute Protonen ($E=25\text{keV}$, $\Phi_{in} \sim 1.5^\circ$) angeregt und in einem dem Elektronenspektrometer nachgeschalteten SPLEED-Detektor durch Mott-Streuung an einem W(100)-Einkristall auf ihre Polarisation analysiert (siehe Abschnitt 3.2). Dabei zeigte es sich, daß der Verlauf der erhaltenen Spin-Polarisation als Funktion der Cr-Bedeckung von der Informationstiefe abhängt. Während man für Informationstiefen von 2..3 Monolagen (4keV-Elektronenanregung) im wesentlichen eine kontinuierliche Abnahme der Spin-Polarisation mit zunehmender Bedeckung erhält, ergibt sich bei einer Informationstiefe von ca. 0.5ML (Protonenanregung, $E_e \sim 10..20\text{eV}$) ein ähnlicher Verlauf wie in den Messungen zum Elektroneneinfang bei der streifenden Streuung. Diese Ergebnisse sind in der Abb. 7-10 dargestellt. Auch hier zeigt sich die Variation der Polarisation im Bereich der ersten Monolage für verschiedene Einzelexperimente. Eine Analyse der verschiedenen Daten unter Berücksichtigung des transienten Lagenwachstums und der Interdiffusion – wenn auch mit einem etwas abweichenden Modell gegenüber dieser Arbeit [POW01] – führen auf magnetische Gesamt-Momente der einzelnen Lagen, die mit den hier erhaltenen Ergebnissen gut vereinbar sind.

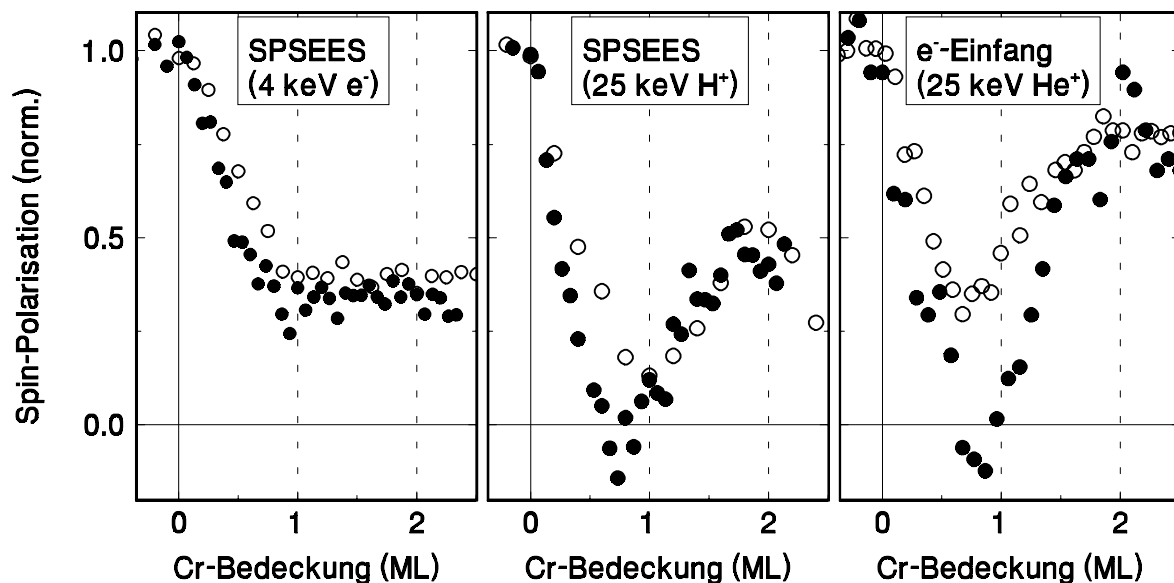


Abb. 7-10 Ergebnisse der Messungen zur Spin-Polarisation von Sekundär-Elektronen mit unterschiedlichen Informationstiefen nach Anregung durch 4keV-Primärelektronen ($\Phi_{in} \sim 33^\circ$) bzw. 25keV Protonen ($\Phi_{in} \sim 1.5^\circ$) beim Wachstum von Cr/Fe(100) [POW01] im Vergleich zum Einfang polarisierter Elektronen in den $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand bei der streifenden Streuung von 25keV He^+ ($T \sim 600\text{K}$).

Zusammenfassend ist festzustellen, daß man beim anfänglichen lagenweisen Wachstum von Cr/Fe(100) das niedrigste Oberflächen-Nettomoment bei einer nominellen Cr-Bedeckung von ca. 0.7 Monolagen vorfindet. Dieses ist deutlich kleiner als das Moment der Fe(100)-Oberfläche, erreicht aber nur selten Werte um Null oder darunter. Bei einer Bedeckung von ca. 2 Monolagen erreicht das Ober-

flächen-Nettomoment des Films ein Maximum und fällt mit zunehmender Schichtdicke stetig ab. Für die atomaren magnetischen Momente findet man in der ersten an das Fe(100) grenzenden „Cr-Lage“ (das ist hier aufgrund der Interdiffusion die oberste Substrat-Lage) eine deutliche antiferromagnetische Kopplung des Cr zum Fe(100). Ab der folgenden Lage koppelt das Cr in der Oberfläche ferromagnetisch zum Fe-Substrat. Das in den wachsenden Film eingebettete Fe zeigt in der 2. Cr-Lage (erste Film-Lage) eine antiferromagnetische Kopplung zum Cr innerhalb dieser Lage und damit auch zum Fe-Substrat.

Es sei abschließend noch einmal darauf hingewiesen, daß sich die Gültigkeit der hier vorgestellten Ergebnisse stets nur auf die Wachstums-Phase bezieht, in der sich die entsprechenden Atome an der Oberfläche des Systems befinden. Eine mögliche Änderung der magnetischen Momente in abgedeckten Bereichen durch die Kopplung an benachbarte Lagen wird mit der hier angewendeten Methode nicht erfaßt.

7.4 Mn/Fe(100)

Das System Mn/Fe(100) ist hinsichtlich seiner magnetischen Eigenschaften in der Vergangenheit sowohl in theoretischen [WF95, MEJ95, BNK95, VBD96, NWZ97, HB98, BLÜ98] wie auch in experimentellen Arbeiten [WH93, RKH95, AFY97, DSH97, RG97, TUC00] überwiegend im Bereich der Sub-Monolagen-Bedeckung bis hin zu einer Monolage untersucht worden. Zum großen Teil ist man dabei aber von einem idealen Lagen-Wachstum ausgegangen. Eine mögliche Interdiffusion an der Grenzfläche wurde erst in jüngere theoretische Studien einbezogen [BLÜ98]. Dementsprechend kam man bei der Interpretation der Meßdaten bzw. durch die verschiedenen theoretischen Voraussetzungen zu uneinheitlichen Ergebnissen, die ganz verschiedene Konfigurationen der magnetischen Momente einschließen. Wie schon beim System Cr/Fe(100) wurden in den experimentellen Arbeiten Meßmethoden mit Informationstiefen von mehreren Monolagen angewendet (XMCD, MOKE, XPS, SPEELS und SEMPA)⁽²⁶⁾, die eine lagenweise Aufschlüsselung der Signale erschweren. Soweit der Sub-Monolagen-Bereich untersucht wurde, finden sich stets Hinweise auf eine antiferromagnetische Kopplung des Mn zum Fe(100), aber auch eine *in-plane* antiferromagnetische Kopplung des Mn wird theoretisch in Betracht gezogen [WF95, VBD96]. Dabei reichen die absoluten magnetischen Momente des Mn von 3 bis $4.5\mu_B$. Bei Bedeckungen mit einer Monolage wird überwiegend eine *in-plane* antiferromagnetische Kopplung des Mn mit einer $c(2\times 2)$ -Struktur der magnetischen Einheitszelle favorisiert. Jedoch auch die antiferromagnetische [WH93, AFY97, TUC00] sowie die ferromagnetische Kopplung zum Fe(100) [MEJ95, BNK95, AFY97, AFB98] mit magnetischen Momenten im Bereich $\mu_{Mn}=1..3.5\mu_B$ (*in-plane* ferromagnetische Kopplung) wurden als Ergebnisse angeführt. Für die zweite Monolage Mn sind kaum noch Untersuchungen durchgeführt worden: Der frühe experimentelle Befund von Walker und Hopster [WH93] einer antiferromagnetischen Kopplung des 2 Monolagen dicken Mn-Films zum Fe(100) findet aus theoretischer Perspektive gleichermaßen Bestätigung

²⁶ XMCD – X-ray Magnetic Circular Dicroism; MOKE – Magneto Optical Kerr Effect; XPX – X-ray Photoemission Spectroscopy; SPEELS – Spin Polarized Electron Energy Loss Spectroscopy; SEMPA – Secundary Electron Microscopy with Polarization Anlaysis

[WF95, BNK95] wie auch Widerspruch [MEJ95, HB98, BLÜ98]. MCD-Studien an Mn-Filmen bis $\Theta_{\text{Mn}} \sim 10\text{ML}$, gewachsen bei $T \sim 300\text{K}$, von Andrieu *et al.* [AFB98] werden mit einer ausschließlich ferromagnetischen Kopplung des Mn an das Fe(100) interpretiert, wobei das magnetische Moment kontinuierlich abnimmt und ab etwa 4ML verschwindet. Tulchinsky *et al.* [TUC00] finden mittels SEMPA eine kollineare Kopplung des Mn zum Fe(100)-Whisker, die eine lagenweise Oszillation mit ferromagnetischer (antiferromagnetischer) Kopplung für gerade (ungerade) Anzahl der Mn-Lagen zeigt und damit in enger Analogie zu entsprechenden Ergebnissen am Cr/Fe(100) mit der gleichen Untersuchungsmethode stehen [PCU93].

Die kontrovers diskutierten Eigenschaften der magnetischen Kopplung von Mn/Fe(100) sowie die aktuellen Erkenntnisse bezüglich transient lagenweisem Wachstum und Grenzflächen-Interdiffusion (Abschnitt 6.3) regten die Durchführung der hier vorgestellten Messungen zum Einfang polarisierter Elektronen von diesem System an.

Betrachtet man die Messungen beim Wachstum von Mn/Fe(100) bei 300K in der Abb. 7-11 (linke Spalte), so findet sich zu Beginn des Wachstums ein analoges Verhalten wie am System Cr/Fe(100): Die Bahn-Polarisation P_L steigt bis zu einer nominellen Mn-Bedeckung von einer Monolage leicht an und bleibt anschließend nahezu konstant. Die Spin-Polarisation zeigt mit dem einsetzenden Mn-Wachstum eine starke Abnahme und ist bei ca. einer halben Monolage nahezu verschwunden. Darüber hinaus bleibt dieses sehr niedrige Niveau der Spin-Polarisation im Gegensatz zum Cr/Fe(100) auch beim weiteren Filmwachstum bestehen.

Selbst ohne eine detaillierte Auswertung bestätigt die rapide Abnahme der Spin-Polarisation im Sub-Monolagen-Bereich auf einen Wert nahe Null das Auftreten einer antiferromagnetischen Kopplung des Mn zum Fe(100). Darüber hinaus ist das Fehlen einer deutlichen Spin-Polarisation für Filmdicken oberhalb etwa einer halben Monolage mit einer *in-plane* antiferromagnetischen Kopplung vereinbar. Dennoch kann aus den Meßdaten aus qualitativer Sicht bei dem nur sehr schlecht ausgebildeten Lagenwachstum (vgl. Streu-Intensitäten in linker Spalte der Abb. 7-11) durch die Beteiligung mehrerer offener Lagen an der aktuellen Oberfläche auch eine lagenweise antiferromagnetische Kopplung mit einer *in-plane* ferromagnetischen Kopplung des Mn interpretiert werden.

Für das veränderte Wachstum der Mn-Filme bei deutlich höherer Temperatur von $T = 600 \pm 20\text{K}$ findet sich die prinzipiell gleiche Abhängigkeit der Spin-Polarisation von der Mn-Bedeckung (rechte Spalte in Abb. 7-11). Selbst beim Übergang zum Inselwachstum ab etwa 4ML nomineller Mn-Bedeckung bleibt die Spin-Polarisation auf dem niedrigen mit Null zu vereinbarem Wert. Da sich hier die Verhältnisse der Anteile einzelner Lagen an der offenen Oberfläche ändern sollten, wird durch dieses Verhalten die Interpretation einer *in-plane* antiferromagnetischen Kopplung in reinen Mn-Lagen unterstützt.

Die starke Umstrukturierung der Oberfläche beim Inselwachstum oberhalb etwa 4ML Mn-Bedeckung ($T = 600\text{K}$) spiegelt sich wie im Intensitätsverlauf gestreuter Projektile in einer sichtlichen Abnahme der Bahn-Polarisation wider, die gleichermaßen auf den erheblichen Verlust der korrelierten Streuung des He an der Oberfläche zurückgeführt werden kann. Dies steht in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Polarisations-Messungen bei der winkelabhängigen Streuung (Abschnitt 5.2).

Auch die Gesamt-Intensität des Fluoreszenzlichts (oberer Teil der Abb. 7-11) weist eine deutliche Abhängigkeit vom Streuprozeß auf. Das gegenphasige Verhalten zur spekularen Streuausbeute zeigt hier deutlich, daß die Anregungswahrscheinlichkeit des atomaren Zustandes ($\text{HeI}3^3\text{P}$) an die Art der Wechselwirkung mit der Oberfläche gekoppelt ist. So führt die starke Erhöhung der Oberflächen-Rauhigkeit zu Beginn des Wachstums bei 300K zu einer deutlichen Zunahme der harten Stöße bei der Streuung, die sich in einer erhöhten Intensität des Fluoreszenzlichts manifestiert. Entsprechend geringer fällt diese anfängliche Intensitäts-Zunahme bei verbessertem Film-Wachstum bei 600K aus. So, wie sich die periodisch ändernde Oberflächen-Morphologie beim transient lagenweisen Wachstum auch in der entsprechenden Oszillation der Fluoreszenz-Intensität äußert, werden beim Übergang zum Inselwachstum bei 600K ab etwa 4ML mit der erhöhten Zahl harter Stöße entsprechend mehr Projektile angeregt.

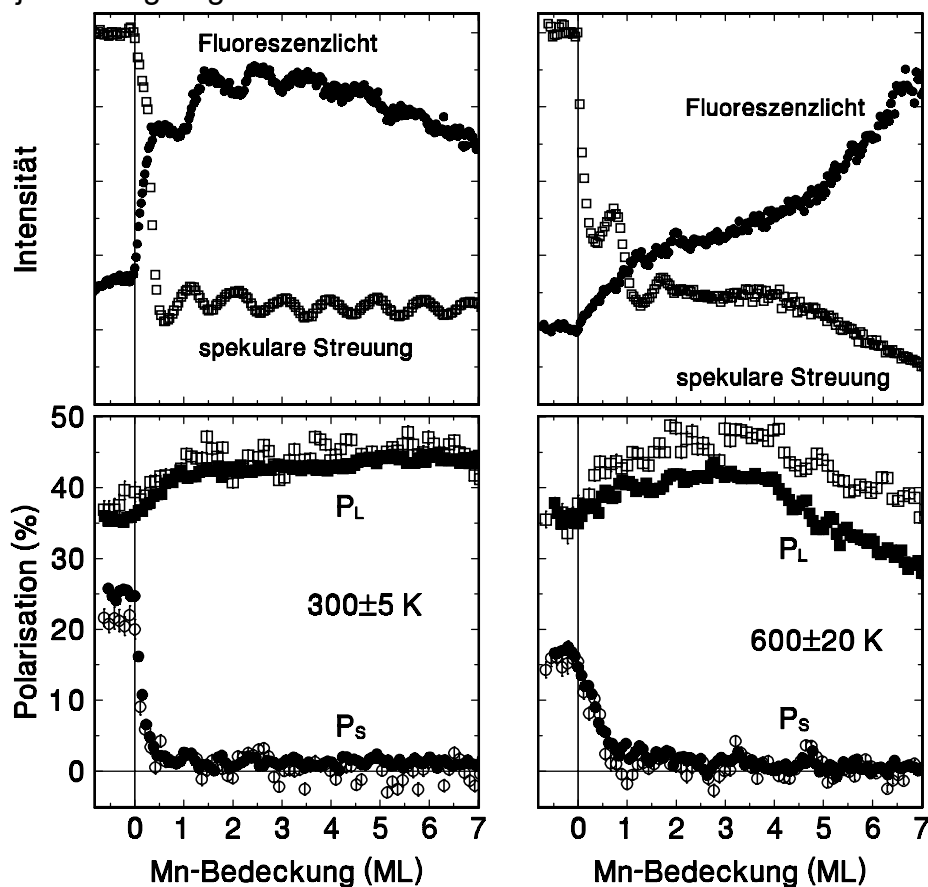


Abb. 7-11 Ergebnisse der Spin- und Bahn-Polarisations-Messungen am $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand nach Streuung von 25keV-He^+ ($\Phi_{\text{in}} \sim 1.5^\circ$) an Mn/Fe(100) während des Film-Wachstums bei $300 \pm 5\text{K}$ bzw. $600 \pm 20\text{K}$ (unten, offene Symbole: Messung mit Polarisationsautomat, geschlossene Symbole: Messung mit Zweikanal-detektor). Zur Verifizierung des Wachstumsmodus sind im oberen Teil der Abbildung die Gesamt-Intensität des Fluoreszenzlichts bei der Polarisations-Messung sowie Vergleichs-Daten der spekularen Streuausbeute gezeigt.

Den Erkenntnissen aus Abschnitt 5.2 folgend, wird die Spin-Polarisation unter den aktuellen Bedingungen nicht von der Art der Stöße und somit nicht von der reinen Morphologie der Oberfläche beeinflusst. Demzufolge können die unterschiedlichen Verläufe der Spin-Polarisation im Sub-Monolagen-Bereich bei Variation der Temperatur (Abb. 7-12) ungeachtet der aktuellen Inseldichten auf die entsprechende

chemische Zusammensetzung und die damit verbundenen Unterschiede in der magnetischen Kopplung zurückgeführt werden. Implizit spielt bei einem Übergang von der antiferromagnetischen Kopplung des Mn an das Fe(100)-Substrat zur *in-plane* antiferromagnetischen Kopplung die Inseldichte dennoch eine Rolle für die Entwicklung des Gesamtmoments, da das *in-plane* Kopplungsverhalten über die Cluster- bzw. Inselgröße an die lokale Ordnung der einzelnen Atomsorten gebunden ist [NWZ97, BLÜ98]. Die Möglichkeit verschiedener Kopplungen, abhängig von der Position des Mn und der Art seiner nächsten Nachbarn, läßt insbesondere durch den wahrscheinlichen Übergang schon während des Wachstums der ersten Monolage [RKH95] keine analoge Berechnung der magnetischen Momente wie beim Cr/Fe(100) zu.

Um dennoch die Größe des magnetischen Moments vom Mn während des frühen Wachstums abzuschätzen ist die lokale Struktur/Ordnung von Mn und Fe an der Oberfläche zu berücksichtigen:

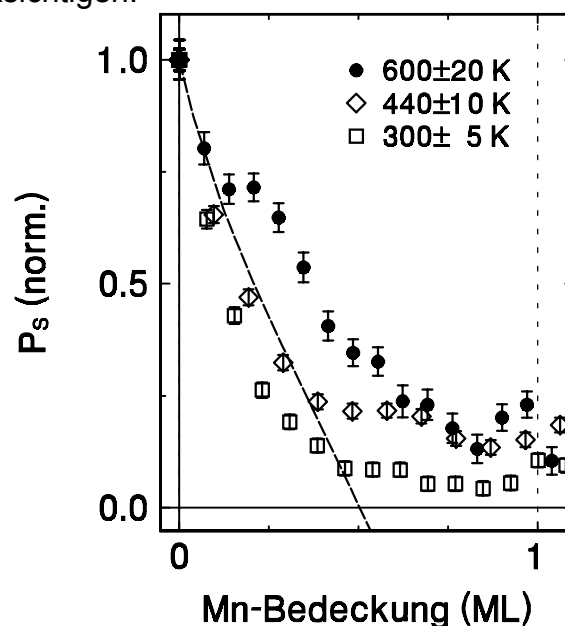


Abb. 7-12 Normierter Verlauf der Spin-Polarisation für das Sub-Monolagen-Wachstum von Mn/Fe(100) bei unterschiedlichen Temperaturen.

Aus dem nahezu identischen Verlauf des Auger-Signals beim Wachstum von Mn/Fe(100) bei 300K und 600K kann auf ähnliche Konzentrationen des Mn in den oberen Lagen des Systems geschlossen werden. Unabhängig von den Inselgrößen und -abständen führt dennoch der etwas geringere Bedeckungsgrad der ersten Filmlage für $\Theta=1\text{ML}$ bei 300K ($\approx 73\%$) gegenüber 600K ($\approx 80\%$) in dem verwendeten Modell auf eine etwas reduzierte Interdiffusion von Mn und Fe an der Grenzfläche, also zu einem etwas erhöhten Mn-Anteil in der ersten Filmlage.

Da entsprechend dem Wachstumsmodell bei sehr geringen Mn-Bedeckungen fast das gesamte Mn statistisch gleichverteilt in die Substrat-Oberfläche eingebettet wird, ist das Moment für quasi einzeln eingebettete Mn-Atome in einer Fe(100)-Oberfläche hier am sichersten abzuschätzen. So erhält man aus der Abnahme der Spin-Polarisation auf 82.5% des Ausgangswertes bei $\Theta=0.05\text{ML}$ (300 und 600K) für das Mn ein magnetisches Moment von $\mu_{\text{Mn}} \approx 2.19 \times \mu_{\text{Fe}}$, das demzufolge in der Größenordnung von $4..4.5\mu_{\text{B}}$ liegt. Dies steht in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen von J. Dresselhaus *et al.* bzw. O. Rader *et al.*, die mittels magnetischem Zirkular-

Dichroismus (MCD) für eine Mn-Bedeckung von etwa 0.3ML ein lokales magnetisches Moment von $\mu_{\text{Mn}}=4.55\mu_{\text{B}}$ ermitteln [DSH97] bzw. für 0.03ML Mn/Fe(100) ein unteres Limit von $\mu_{\text{Mn}}=4\mu_{\text{B}}$ abschätzen [RGS97].

Betrachtet man den fortgesetzten Verlauf der normierten Spin-Polarisation als Funktion der Bedeckung mit dem bei $\Theta\sim 0.05\text{ML}$ abgeschätzten magnetischen Moment des Mn bei konstantem Fe-Moment, so findet sich bis $\Theta\sim 0.5\text{ML}$ eine Polarisation, die oberhalb der Werte für 300K und unterhalb der Werte für 600K liegt (Linie in Abb. 7-12). Dies kann durch unterschiedliche Einflüsse erklärt werden. So sind die niedrigen Polarisationswerte für $T\approx 300\text{K}$ mit einer Reduktion des Fe-Moments bei der Legierungsbildung vereinbar, wie sie bereits beim System Cr/Fe(100) ermittelt wurde und für das System Mn/Fe(100) bei Raumtemperatur auch aus der Entwicklung der Fe-MCD-Spektren von Dresselhaus *et al.* gefolgert wurde [DSH97].

Weiterhin führen die um eine Größenordnung verschiedenen Nukleationsabstände von $25\pm 10\text{\AA}$ bei 300K und $250\pm 30\text{\AA}$ bei 600K (Abschnitt 6.3.1) bei gleicher nomineller Mn-Bedeckung (Sub-ML) auf einen Unterschied der mittleren Fläche einer Insel von zwei Größenordnungen. Da eine Insel zunächst prinzipiell als Fe-Insel zu wachsen beginnt und der Mn-Anteil nur langsam zunimmt, (vgl. Abb. 6-26), ist die Inhomogenität der Mn/Fe-Verteilung innerhalb der wachsenden Lage bei 600K deutlich stärker als bei 300K Wachstumstemperatur. Sofern man von einem solchen "Fe-Kern" der wachsenden Insel sprechen kann, ist also dessen Fläche bei 600K etwa 100 mal größer als bei 300K. Schematisch wurde das im Zusammenhang mit der Untersuchung des Wachstums (Abschnitt 6.3.2) in der Abb. 6-25 veranschaulicht.

Demzufolge ist in diesen "Kern"-Bereichen bei 600K eine Reduktion des Fe-Moments nicht zu erwarten. Weiterhin führt die entsprechend höhere Mn-Konzentration in den Randbereichen der Inseln bzw. in der noch offenen und mit zunehmender Inselgröße zunehmend abgedeckten Substrat-Oberfläche zu einer vermehrt einsetzenden Mn-Mn-Wechselwirkung, die bei der dabei prognostizierten *in-plane* antiferromagnetischen Kopplung nicht mehr so stark zur Verringerung des Gesamtmoments und dementsprechend der gemessenen Spin-Polarisation beiträgt. Analoge Ergebnisse wurden von O. Rader *et al.* [RGS97] mittels MCD-Messungen für das Wachstum bis 1ML Mn/Fe(100) bei Raumtemperatur ermittelt. Das Einsetzen der *in-plane* antiferromagnetischen Kopplung des Mn kann gleichermaßen für die verringerte Abnahme der Spin-Polarisation oberhalb etwa 0.5ML verantwortlich gemacht werden, ab der im gesamten Temperaturbereich das Wachstum in der nächsten Film-Lage einsetzt, welche nahezu ausschließlich aus Mn besteht. Die unterschiedlichen Eigenschaften beim Wachstum von Mn/Fe(100) – die inhomogene Legierungsbildung, die Reduzierung der lokalen Momente und der Wechsel der interatomaren magnetischen Kopplung in Abhängigkeit der lokalen Umgebung – lassen mit den hier zur Verfügung stehenden experimentellen Daten ohne eine noch genauere Kenntnis der Wachstumsvorgänge keine Ermittlung lokaler magnetischer Momente für größere Mn-Bedeckungen zu. Hier wären orts aufgelöste STM-Messungen wünschenswert, die laut Vorhersagen von Heinze & Blügel neben der Unterscheidung der verschiedenen Atomsorten auch Aufschlüsse zur magnetischen Kopplungsrichtung anhand der Lage unterschiedlicher Oberflächenzustände ermöglichen sollen [HBW98]. Die hier vorgestellten Ergebnisse zur auftretenden

Interdiffusion und zum Temperatur-abhängigen Verlauf der Spin-Polarisation zeigen, daß, solange die lokale Struktur der Mn-Fe-Grenzfläche als Funktion der Bedeckung nicht vollständig geklärt ist, sowohl bei der Interpretation experimenteller Ergebnisse wie auch bei den an spezielle Modelle geknüpften theoretischen Untersuchungen viel Raum für Spekulationen bleibt.

7.5 V/Fe(100)

Vanadium als ein weiterer Vertreter der 3d-Metalle ist im Volumen paramagnetisch. Dennoch gibt es Hinweise, die auf ein magnetisches Moment an der Oberfläche hinweisen. So zeigten Suszeptibilitätsmessungen an V-Nanoteilchen (100-1000Å) ein mit der Oberfläche skalierendes magnetisches Signal. Rau *et al.* fanden aus Messungen mittels Einfang polarisierter Elektronen in Deuterium [RAU82] unterhalb $T \approx 540\text{K}$ eine ferromagnetische Ordnung an der V(100)-Oberfläche [RLS86]. Dies läßt auch für dünne V-Filme erwarten, daß aufgrund der reduzierten Symmetrie ein nichtverschwindendes magnetisches Moment auftritt.

Aus den Ergebnissen des Abschnitts 6.4 geht hervor, daß das Vanadium zu Beginn des Filmwachstums ähnliche Wachstumseigenschaften wie Mn oder Cr auf Fe(100) aufweist. Aufgrund der Ähnlichkeit der elektronischen Struktur mit den benachbarten 3d-Metallen sind auch ähnliche magnetische Kopplungsphänomene beim frühen Wachstum auf Fe(100) zu erwarten, wenn man davon ausgeht, daß die magnetischen Momente durch das Fe(100)-Substrat induziert werden [WH94]. So geht aus den bisher bekannten experimentellen Studien hervor, daß bei V-Bedeckungen bis zu einer Monolage eine antiferromagnetische Kopplung zwischen V und Fe(100) mit sehr kleinen Momenten auftritt [WH94, FTL96, FBH98]. Diese Eigenschaft wird auch durch theoretische Arbeiten untermauert [HB98, MC99]. Uneinigkeit hingegen besteht in der Art der magnetischen Kopplung bei zunehmender Bedeckung wie auch in der Größe der magnetischen Momente. Hier treten die gleichen Probleme wie bereits am Mn/Fe(100) auf, die sich sowohl auf die Informationstiefe mehrerer Monolagen der verwendeten Meßmethoden als auch auf die bisher nicht berücksichtigte Interdiffusion an der Grenzfläche gründen. So wurde unter Annahme eines reinen V-Films bei $\Theta = 1\text{ML}$ von Fuchs *et al.* ein magnetisches Moment von $\mu_V = 0.3 \pm 0.08 \mu_B$ gefunden [FTL96], während Walker *et al.* ein Moment nahe $1 \mu_B$ angeben [WH94]. Diese Werte stimmen etwa mit den theoretischen Erwartungen von $0.6 \mu_B$ [HB98] bzw. $0.97 \mu_B$ [MC99] überein. Deutlicher unterscheiden sich die Ergebnisse ab $\Theta = 2\text{ML}$: Hier wurden die mit unterschiedlichen Methoden erhaltenen Meßergebnisse mit einer ferromagnetischen Kopplung (SPSEES⁽²⁷⁾) [FTL96], einer antiferromagnetischen Kopplung (MCD) [FBH98] oder auch mit einem verschwindenden magnetischen Moment (SPEELS) [WH94] interpretiert.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das System V/Fe(100) in Analogie zu den Systemen Cr/Fe(100) und Mn/Fe(100) mittels dem Einfang polarisierter Elektronen bei der streifenden Streuung von 25keV He^+ -Ionen während des Wachstums bis etwa 5ML kontinuierlich bzw. separat für $\Theta \approx 15\text{ML}$ bei verschiedenen Temperaturen untersucht.

²⁷ SPSEES – Spin Polarized Secondary Electron Emission Spectroscopy

Die Ergebnisse der durchgeführten Messungen in der Abb. 7-13 zeigen ein ähnliches Verhalten der Intensität und Polarisierung wie bei Cr/Fe(100) und Mn/Fe(100). Der Intensitätsverlauf im oberen Teil der Abbildung zeigt für $T \approx 450\text{K}$ und $T \approx 620\text{K}$ nur geringe Unterschiede, was das kaum veränderte Wachstum in diesem Temperaturbereich untermauert. Die lagenweise Oszillation der Fluoreszenzintensität gestattet eine recht genaue Zuordnung der Polarisierung zur Dicke des V-Films.

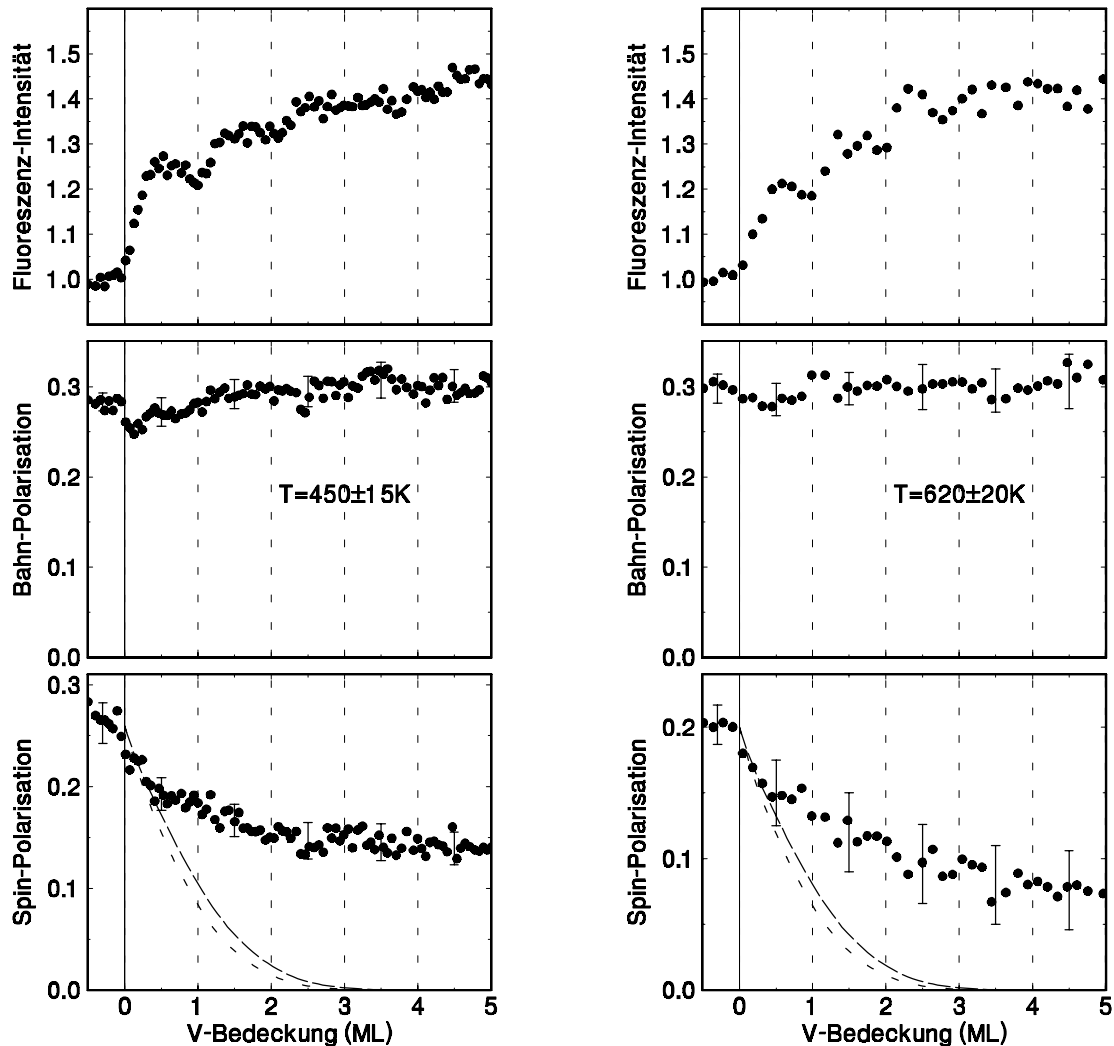


Abb. 7-13 Ergebnisse der Fluoreszenzintensität sowie der Spin- und Bahn-Polarisationsmessungen am $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand nach Streuung von 25keV-He^+ ($\Phi_{\text{in}} \sim 1.5^\circ$) an V/Fe(100) während des Film-Wachstums bei $450 \pm 15\text{K}$ bzw. $620 \pm 20\text{K}$. Die Fehlerbalken geben exemplarisch die Streuung zwischen verschiedenen Messungen unter gleichen experimentellen Bedingungen an.

Die Bahn-Polarisation zeigt während des Wachstums der ersten Monolagen im Rahmen der Meßunsicherheit keine wesentliche Änderung, obwohl hier ein Anstieg wie beim Cr/Fe(100) und Mn/Fe(100) aufgrund der Erniedrigung der Austrittsarbeit von ca. 0.3eV bei $\Theta = 1\text{ML}$ zu erwarten ist. Auch die Abnahme der Spin-Polarisation während des anfänglichen Filmwachstums fällt für das V/Fe(100) vergleichsweise deutlich schwächer aus. Es kommt hier weder zur Ausbildung eines Minimums im Bereich der Sub-Monolagen-Bedeckung wie bei den Cr-Filmen noch verschwindet die Spin-Polarisation bereits im frühen Wachstumsstadium wie beim Mn-Film. Sowohl für $T \approx 450\text{K}$ als auch für $T \approx 620\text{K}$ beobachtet man hier eine auch bei

mehrlagigen V-Filmen kontinuierlich abnehmende Spin-Polarisation. Selbst bei Bedeckungen mit ca. 15ML V/Fe(100) konnte bei $T \approx 600\text{K}$ noch etwa 25% und bei $T \approx 450\text{K}$ sogar noch 50% der anfänglichen Spin-Polarisation nachgewiesen werden. Dies zeigt, daß die Oberfläche des wachsenden V-Films über einen weiten Bedeckungsbereich ferromagnetisch zum Fe(100) koppelt. Bei Erreichen einer praktisch reinen V-Oberfläche bei etwa 3..4ML kann man aus dem entsprechenden Signal der Spin-Polarisation ein mittleres magnetisches Moment von $\mu_V \approx 0.6\mu_B$ bei 450K bzw. $0.4\mu_B$ bei 620K abschätzen. Das ändert sich mit zunehmender Schichtdicke entsprechend dem Signalverlauf und der Stichproben-Messungen bei größeren Schichtdicken bis $\sim 15\text{ML}$ auch nur unwesentlich.

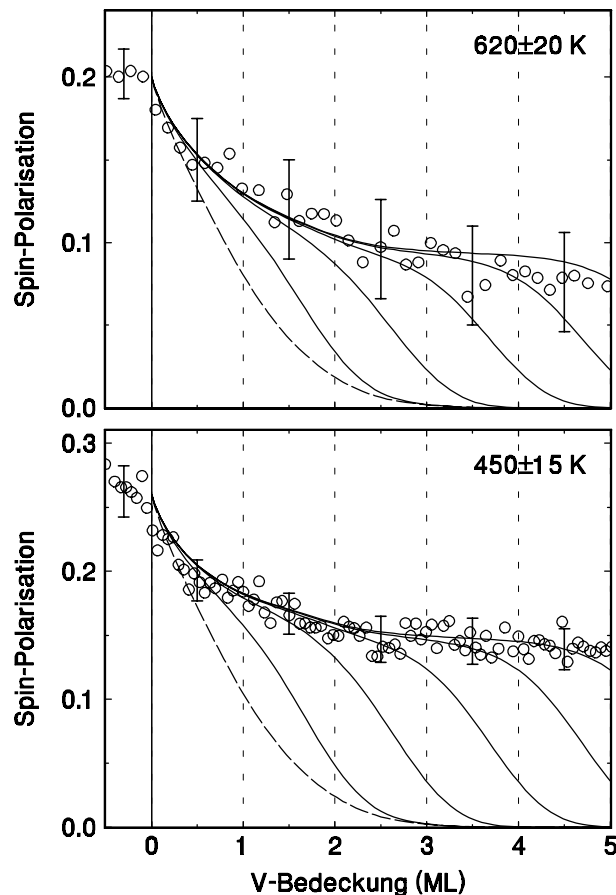


Abb. 7-14 Ergebnisse der (lagenweisen) Modellrechnung für die Spin-Polarisation mit positivem und konstantem magnetischen Moment des Vanadium an der Filmoberfläche ab der zweiten Film-Lage (siehe Text).

Die nur schwache Abnahme der Spin-Polarisation zu Beginn des Wachstums weist in Übereinstimmung mit früheren Messungen [FTL96] auf ein relativ kleines Moment des Vanadium hin. Die relativ großen Meßunsicherheiten und die geringe Zuverlässigkeit der Ergebnisse zu den Wachstumseigenschaften bezüglich Füllung der Monolagen und Interdiffusionsprofil (siehe Abschnitt 6.4) verhindern eine sichere Bestimmung der Kopplungsrichtung im Sub-Monolagen-Bereich aus den vorliegenden Daten: Mit der aus den Auger-Daten bestimmten mittleren Abnahme des Fe-Anteils an der Oberfläche erhält man unter der Voraussetzung eines unveränderten magnetischen Fe-Moments und mit $\mu_V = 0\mu_B$ den in der Abb. 7-13 als Strich-Linie gezeigten Verlauf. Berücksichtigt man noch zusätzlich eine Abnahme des Fe-Moments um 20% bis zu $\Theta = 1\text{ML}$ [FTL96, MC99], so ergibt sich der als Punkt-

Linie eingetragene theoretische Verlauf der Spin-Polarisation. Der Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt, daß zu Beginn des Wachstums mit einem verschwindenden Moment des Vanadium zu rechnen ist. Ab etwa einer halben Monolage wird zunehmend eine deutlich höhere Spin-Polarisation erreicht, als sie mit einem verschwindenden V-Moment auftreten dürfte. Da in diesem Wachstumsstadium aufgrund der Interdiffusion von V in die oberste Substratlage im Bereich der Inseln bereits 2 Lagen (wenn auch in geringer Konzentration) Vanadium enthalten, kann sich die Kopplung in der obersten Substratlage und der ersten Adsorbatlage bereits unterscheiden. Geht man in einem stark vereinfachten Modell von konstanten magnetischen Momenten des V ab der ersten Adsorbatlage (wie bei $\Theta \approx 3..4\text{ML}$ bestimmt), einem verschwindenden Moment in der obersten Substratlage $\mu_V = 0\mu_B$ und einem unveränderten Fe-Moment aus, so ergibt sich entsprechend dem mittleren Verlauf des Wachstums mit jeder weiteren berücksichtigten Lage eine recht gute Anpassung der einhüllenden Kurve an die gemessene Spin-Polarisation sowohl für $T \approx 450\text{K}$ als auch für $T \approx 620\text{K}$. Der entsprechende Verlauf der so berechneten Spin-Polarisation ist in der Abb. 7-14 unter Hinzunahme je einer weiteren Schicht dargestellt.

Folglich ergibt sich hier ein ähnliches Bild sowohl für das Wachstum wie auch für die magnetische Kopplung zum System Cr/Fe(100), bei dem nach der antiferromagnetischen Kopplung des Cr in der obersten Substratlage für die nachfolgenden Schichten eine ferromagnetische Kopplung zum Substrat mit nahezu konstantem magnetischen Moment ermittelt wurde.

8 ZUSAMMENFASSUNG

Die Fe(100)-Oberfläche und darauf gewachsene epitaktische 3d-Metall-Filme wurden mittels streifender Ionenstreuung bezüglich Struktureigenschaften, Morphologie, Wachstumsverhalten, Grenzflächen-Interdiffusion und magnetischer Kopplungseigenschaften studiert. Mit diesen Untersuchungen wurde das Potential der streifenden Ionenstreuung zur Charakterisierung von Metall-Oberflächen hinsichtlich o.g. Eigenschaften dargestellt.

Fokussierungseffekte bei der Streuung entlang niedrigindizierter Richtungen (achsiales Channeling) erlauben die Verifizierung der lateralen Struktur der Oberfläche. Eine multimodale Struktur der zweidimensionalen Streuverteilung beim achsialen Channeling kann durch den Verlauf der Projektil-Trajektorien erklärt werden. Ein Vergleich der experimentellen Streuverteilungen mit Monte-Carlo-Computersimulationen erlaubt Rückschlüsse auf den Verlauf des Wechselwirkungspotentials zwischen Projektil und Targetatomen vor der Oberfläche [DPI01].

Aus der Untersuchung der polaren Streuverteilung bei der Streuung entlang hochindizierter Richtungen (planares Channeling) wurden im Zusammenhang mit Computersimulationen mittlere Terrassenbreiten der Oberflächen und die thermischen Schwingungen der Oberflächen-Atome in Richtung der Oberflächen-Normalen quantitativ bestimmt. Abhängig von Ausheiltemperatur und -dauer beträgt die mittlere Terrassenbreite der präparierten Fe(100)-Oberfläche zwischen 300 und über 1000Å. Aus der Breite der polaren Streuverteilung wurde die Zunahme der thermischen Schwingungen der Fe(100)-Oberflächenatome entsprechend dem Debye-Modell [GLA55] zwischen 300 und 700K mit der Oberflächen-Debye-Temperatur $T_{\perp}^S = 227\text{K}$ verifiziert. Oberhalb 700K nehmen die mittleren thermischen Auslenkungen aus der Oberfläche stärker zu und steigen von $\sim 0.2\text{Å}$ bei 700K linear auf $\sim 0.3\text{Å}$ bei 900K an.

Die Abhängigkeit der Winkelverteilung streifend gestreuter Ionen – insbesondere der spekularen Streuintensität – von der Oberflächenmorphologie wurde zur Charakterisierung des Filmwachstums von Fe/Fe(100), Cr/Fe(100), Mn/Fe(100) und V/Fe(100) ausgenutzt. Alle untersuchten Systeme zeigten ein pseudomorphes Wachstum. Das homoepitaktische Wachstum von Fe/Fe(100) dient dabei als Modellsystem, bei dem ausschließlich morphologische Größen den Streuprozess beeinflussen und somit der Einfluß der wesentlichen Wachstumsparameter Temperatur und Aufdampfrate F studiert werden konnte. Bei einer mittleren Rate von $F \sim 1 \times 10^{-2} \text{MLs}^{-1}$ wurde bei $T \sim 300\text{K}$ stationäres Lagenwachstum unter Beteiligung mehrerer offener Monolagen beobachtet. Mit zunehmender Temperatur nimmt auch die Qualität des lagenweisen Wachstums zu und geht bei mittleren Terrassenbreiten von $\sim 2000\text{Å}$ ab etwa 700K in ein Wachstum von Stufenkanten ("Step-Flow") über. Die systematische Untersuchung der Sättigungsinseldichten für verschiedene Temperaturen und Depositionsraten erlaubte die Bestimmung der kritischen Keimgrößen als Funktion der Temperatur sowie der Aktivierungsenergie für Monomer-Diffusion von Fe auf

Fe(100) von $E_d=(0.44\pm0.05)\text{eV}$. So sind Dimere bis etwa 520K und Trimere bis etwa 620K stabil. Bei noch höheren Temperaturen nimmt die kritische Keimgröße stark zu. Die hier erhaltenen Ergebnisse stehen in sehr guter Übereinstimmung mit den Resultaten aus STM-Untersuchungen von Stroscio *et al.* [SPD93].

Das Wachstum von Cr-Filmen auf Fe(100) mit einer Aktivierungsenergie von $E_d=0.9\text{eV}$ für die Monomer-Diffusion zeigt gegenüber dem Fe/Fe(100) ein schlechteres transient lagenweises Wachstum. Die günstigste Wachstumstemperatur für laterales Wachstum liegt bei etwa 600..630K. Bei typischen Depositionsraten von $F\sim1..2\times10^{-3}\text{MLs}^{-1}$ kann hier für die erste Filmlage ein Füllungsgrad von etwa 95% gegenüber <90% bei $T\sim360\text{K}$ erreicht werden. Beim Wachstum von Mn/Fe(100) und V/Fe(100) nimmt die Qualität des Lagenwachstums aufgrund der erhöhten Gitterfehlانpassung (Mn/Fe(100): 3.2%; V/Fe(100): 5.6%) weiter ab. Bei diesen Systemen liegt ein Stranski-Krastanov-Wachstumsmodus vor und der Füllungsgrad der ersten Monolage beträgt bei $F\sim2\times10^{-3}\text{MLs}^{-1}$ nur noch ca. 80% bei $T\sim600\text{K}$ und ca. 73% bei $T\sim300\text{K}$. Der Übergang von lagenweisem Wachstum zu Inselwachstum erfolgt beim Mn/Fe(100) in der Regel bei einer Bedeckung von 3..4ML und im System V/Fe(100) bereits ab der zweiten Monolage. Unterhalb etwa 420K können die Mn-Filme in einer metastabilen Phase stationär lagenweise aufwachsen, der verspannte Film relaxiert aber beim Tempern über diese Temperatur und bricht auf.

In den untersuchten heteroepitaktischen Systemen wurde mittels Auger-Spektroskopie nach Anregung durch 4keV-Elektronen beziehungsweise streifend gestreute 25keV-Protonen eine deutliche Grenzflächen-Interdiffusion nachgewiesen. Unter Einbeziehung der Ergebnisse aus den morphologischen Untersuchungen in ein entsprechendes Wachstumsmodell, das im Rahmen dieser Arbeit zur Modellierung der Interdiffusion erarbeitet wurde, konnte die Grenzflächen-Interdiffusion quantitativ abgeleitet werden. Man findet nach dem Wachstum der ersten Monolage Cr/Fe(100) bei ca. 600K einen Wechsel von ca. 55% Cr in das Fe-Substrat. Bei dickeren Filmen nimmt der Cr-Anteil in den Film-Lagen stetig zu und etwa ab der vierten Monolage wächst ein reiner Cr-Film. Ab etwa 850K wurde eine deutliche Eindiffusion von Cr in das Fe-Volumen beobachtet. Mn/Fe(100) und V/Fe(100) zeigen eine etwas geringere Grenzflächen-Interdiffusion. Hier werden bei $T\sim600\text{K}$ ca. 40% des Adsorbats im Fe-Substrat eingelagert. Bereits ab der dritten Monolage wächst in diesen Systemen ein reiner Adsorbat-Film. Beim Mn/Fe(100) wurde bereits oberhalb etwa 650K eine deutliche Eindiffusion des Mn in das Fe-Volumen nachgewiesen.

Es konnte gezeigt werden, daß das Wachstum der heteroepitaktischen Cr-, Mn- und V-Filme von einer Erniedrigung der Austrittsarbeit von ca. 0.3eV gegenüber dem unbedeckten Fe(100)-Substrat begleitet ist.

Zur Untersuchung der magnetischen Kopplungseigenschaften der Filme wurde die streifende Ionenstreuung in Verbindung mit dem Einfang polarisierter Elektronen von der Target-Oberfläche in angeregte atomare Zustände eingesetzt und die Spin- und Bahn-Polarisation der Elektronen in diesem Zustand über das zirkular polarisierte Fluoreszenzlicht nachgewiesen. Aus Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Spin-Polarisation wurde die Sensitivität der Methode auf die oberste Atomlage

bestätigt. Der unterschiedliche Verlauf der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Spin-Polarisation beim Einfang von Elektronen in den $\text{HeI}3^3\text{P}$ -Zustand von einer $\text{Fe}(100)$ bzw. einer $\text{Fe}(110)$ -Oberfläche [LEU94] konnte mit Hilfe der elektronischen Zustandsdichte an der obersten Atomlage prinzipiell beschrieben werden. Eine Folgerung dieser Beschreibung ist die Einbeziehung der gesamten besetzten Zustandsdichte der $\text{Fe}(100)$ -Oberfläche in diesen Elektroneneinfang-Prozeß ab einer Projektilgeschwindigkeit von $v_{||} \sim 0.5v_0$, woraus die Beschreibbarkeit der magnetischen Oberflächen-Momente mittels der Spin-Polarisation gefolgert werden kann. Ein wichtiges Ergebnis für die Durchführung der Einfang-Experimente war der Nachweis der Unabhängigkeit der Spin-Polarisation vom Streuwinkel.

Die Anwendung der Methode auf die epitaktischen 3d-Metall-Filme auf $\text{Fe}(100)$ lieferten für diese unterschiedliche magnetische Kopplungen. Zunächst konnte anhand des Systems $\text{Fe/Cr/Fe}(100)$ mit unterschiedlichen Dicken der Cr-Zwischenschicht gezeigt werden, daß die Methode eine eindeutige Unterscheidung zwischen einer ferromagnetischen und einer antiferromagnetischen Kopplung zwischen Deckschicht und Substrat erlaubt.

Unter Berücksichtigung von Morphologie und chemischer Zusammensetzung der Filme wurden die Ergebnisse der Polarisationsmessungen an den Filmsystemen mit unterschiedlichen Kopplungseigenschaften interpretiert. Am System $\text{Fe/Fe}(100)$ wird keine Änderung der magnetischen Momente beobachtet. Der an $\text{Cr/Fe}(100)$ beobachtete Verlauf der Spin-Polarisation stimmt mit anderen oberflächensensitiven Methoden [WPH92, POW01] überein und kann mit einer antiferromagnetischen Kopplung des Cr zum $\text{Fe}(100)$ an der Grenzfläche zum sauberen Substrat bei einem atomaren Moment des Cr von ca. $-1.5\mu_B$ interpretiert werden. In wiederholten Messungen wurde insbesondere eine Instabilität der ermittelten Polarisation im Sub-Monolagen-Bereich bestätigt [WPH92], die vermutlich mit einer sensiblen Wechselwirkung zwischen Wachstum und magnetischer Kopplungsstärke in Zusammenhang zu bringen ist. Oberhalb der Cr-Grenzflächenlage (das ist hier die oberste Substratlage mit eindiffundiertem Cr) wird bis $\Theta \sim 20\text{ML}$ ein positives Cr-Oberflächen-Moment beobachtet.

Bei $\text{Mn/Fe}(100)$ wurde bis zur Ausbildung der ersten Monolage generell eine Abnahme der Spin-Polarisation auf einen mit Null verträglichen Wert gefunden, der auch für die folgenden Lagen erhalten bleibt. Dieses Verhalten steht im Einklang mit einer antiferromagnetischen Kopplung einzeln in die Oberfläche eingebetteter Mn-Atome an das Fe-Substrat mit einem atomaren Moment des Mn von ca. $-(4..4.5)\mu_B$. Dagegen führt die Ausbildung größerer "Mn-Cluster" zu einer Wechselwirkung zwischen den Mn-Atomen und ist entsprechend dem Signalverlauf mit einer *in-plane* antiferromagnetischen Kopplung des Mn zu interpretieren.

Schließlich wird am $\text{V/Fe}(100)$ nur eine geringfügige Abnahme der Spin-Polarisation beobachtet, die auf ein verschwindendes magnetisches Moment des Vanadium an der Grenzfläche zum $\text{Fe}(100)$ führt. Für die folgenden Lagen wird ein magnetisches Moment des Vanadium von ca. $0.4..0.6\mu_B$ mit einer ferromagnetischen Kopplung der Oberflächenlage an das $\text{Fe}(100)$ -Substrat ermittelt.

ANHANG

LITERATURVERZEICHNIS

- [AFB98] S. Andrieu, M. Finazzi, P. Bauer, H. Fischer, P. Lefevre, A. Traverse, K. Hricovini, G. Krill, M. Piecuch: Phys. Rev. B 57 (1998) 1985
- [AFL94] J.G. Amar, F. Family, P.M. Lam: Phys. Rev. B 50 (1994) 8781
- [AFP76] H.J. Andrä, R. Fröhling, H.J. Plöhn, J.D. Silver: Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 1212
- [AFY97] S. Andrieu, M. Finazzi, F. Yubero, H. Fischer, P. Arcade, F. Chevrier, K. Hricovini, G. Kill, M. Piecuch: JMMM 165 (1997) 191
- [AHA96] A. Aharoni: Introduction to the Theory of Ferromagnetism, Clarendon Press, Oxford, 1996
- [AR89] C. Argile, G.E. Rhead: Surf. Sci. Rep. 10 (1989) 277
- [AUT96] C. Auth: Dissertationsschrift, Humboldt-Universität zu Berlin 1996
- [BAA98] P. Bencok, S. Andrieu, P. Arcade, C. Richter, V. Ilakovac, O. Heckmann, M. Vesely, K. Hricovini: Surf. Sci. 402-404 (1998) 327
- [BAU58] E. Bauer: Z. Kristallogr. 110 (1958) 372
- [BC98] P. Bruno, C. Chappert: Phys. Rev. Lett. 67 (1998) 1602
- [BCE74] H.G. Berry, L.J. Curtis, D.G. Ellis, R.M. Schectman: Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 751
- [BH94] J.A.C. Bland, B. Heinrich: Ultrathin Magnetic Structures Bd. I + II, Springer, Berlin Heidelberg 1994
- [BH94a] A. Berger, H. Hopster: Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 193
- [BKG99] A.G. Borisov, A.K. Kasansky, J.P. Gauyacq: Phys. Rev. B 59 (1999) 10935
- [BLÜ98] S. Blügel: persönliche Mitteilung, Berlin 1998
- [BNK95] S. Bouarab, H. Nait-Laziz, M.A. Khan, C. Demangeat, H. Dreyssé, M. Benakki: Phys. Rev. B 52 (1995) 10127
- [BOR99] A.G. Borisov: persönliche Mitteilung, Berlin 1999
- [BSV75] U. Bill, R. Sizmann, C. Varelas, K.E. Rehm: Radiat. Eff. 27 (1975) 59
- [BW96] A.G. Borisov, H. Winter: Z. Phys. D 37 (1996) 263
- [BZ96] A.G. Borisov, R. Zimny: Surf. Sci. 359 (1996) 174
- [CC90] Y. Cao, E. Conrad: Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 2808
- [CPP89] P.I. Cohen, G.S. Petrich, P.R. Pukite, G.J. Whaley: Surf. Sci. 216 (1989) 222
- [CHI97] S. Chikazumi: Physics of Ferromagnetism, Clarendon Press, Oxford, 1997
- [CLA71] D. Clarke, J.F. Grainger: Polarized Light and Optical Measurement, Pergamon Press 1971
- [CRA95] D. Craik: Magnetism – Principles and Applications, Wiley & Sons, Chichester 1995
- [DAN99] M. Danailov: persönliche Mitteilung 1999

-
- [DHO91] M.R. Davidson, G.B. Hoflund, R.A. Outlaw: J. Vac. Sci. Technol. A 9 (1991) 1344
- [DKS90] G.H.O. Daalderop, P.J. Kelly, M.F.H. Schurmans: Phys. Rev. B 41 (1990) 11919
- [DPI00] D.M. Danailov, R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Nucl. Instr. Meth. B 164-165 (2000) 583
- [DPI01] D.M. Danailov, R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter, K. Gärtner: Surf. Sci. 171 (2001) 113
- [DRS91] D. Danailov, J.H. Rechten, K.J. Snowdon: Surf. Sci. 259 (1991) 359
- [DS93] M.C. Desjonquères, D. Spanjaard: Concepts in Surface Physics, Springer-Verlag, Berlin, 1993
- [DSH97] J. Dresselhaus, D. Spanke, F.U. Hillebrecht, E. Kisker, G. v.d.Laan, J.B. Goedkoop, N.B. Brookes: Phys. Rev. B 56 (1997) 5461
- [DSP96] A. Davis, J.A. Strosio, D.T. Pierce, R.J.Celotta: Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 4175
- [DSP97] A. Davis, J.A. Strosio, D.T. Pierce, J. Unguris, R.J.Celotta: JMMM 165 (1997) 82
- [DUB31] L.A. DuBridge: Phys. Rev. 39 (1931) 108
- [EJR90] W.F. Egelhoff, Jr., I. Jacob, J.M. Rudd, J.F. Cochran, B. Heinrich: J. Vac. Sci. Technol. A 8 (1990) 1582
- [ELL73] D.G. Ellis: Opt. Soc. Am. 63 (1973) 1322
- [FAW88] E. Fawcett: Rev. Mod. Phys. 60 (1988) 209
- [FB95] D.E. Fowler, J.V. Barth: Phys. Rev. B 52 (1995) 2117
- [FBH98] Finazzia, P. Bencok, K. Hricovini, F. Yubero, F. Chevrier, E. Kolb, G. Krill, M. Vesely, C. Chappert, J.-P. Renard: Thin Solid Films 317 (1998) 314
- [FF85] C.L. Fu, A.J. Freeman: Phys. Rev. B 33 (1985) 1755
- [FFO85] C.L. Fu, A.J. Freeman, T. Oguchi: Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 2700
- [FGB95] A. Fert, P. Grünberg, A. Barthélémy, F. Petroff, W. Zinn: JMMM 140-144 (1995) 1
- [FNK93] Y. Fujii, K. Narumi, K. Kimura, M. Mannami, T. Hashimoto, K. Ogawa, F. Ohtani, and T. Yoshida: Appl. Phys. Lett. 63 (1993) 2070
- [FOM66] V.S. Fomenko: Handbook of Thermoionic Properties, Ed.: E.G.V. Samsanow (Plenum, New York, 1966) 20
- [FOW31] R.H. Fowler: Phys. Rev. 38 (1931) 45
- [FPT96] P. Fuchs, V.N. Petrov, K. Totland, M. Landolt: Phys. Rev. B 54 (1996) 9304
- [FS99] R.S. Fishman, Z.-P. Shi: Phys. Rev. B 59 (1999) 13849
- [FSD97] M. Freyss, D. Stoeffler, H. Dreyssé: Phys. Rev. B 56 (1997) 6047
- [FTL96] P. Fuchs, K. Totland, M. Landolt: Phys. Rev. B 53 (1996) 9123
- [GH79] K. Gärtner, K. Hehl: Phys. Stat. Sol. B 94 (1979) 231
- [GJ78] T.P. Grozdanov, R.K. Janev: Phys. Lett. A 65 (1978) 396
- [GLA55] R. J. Glauber: Phys. Rev. 98 (1955) 1692
- [GOM85] L.J. Gómez et al.: Phys. Rev. B 31 (1985) 2551
- [GSP86] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M.B. Brodsky, H. Sowers: Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2442
- [GV83] W. Graser, C. Varelas: Phys. Scripta T 6 (1983) 153
- [HAA98] Y. Huttel, J. Avila, M.C. Asensio, P. Bencok, C. Richter, V. Ilakovac, O.

-
- Heckmann, K. Hricovini: Surf. Sci. 402-404 (1998) 609
- [HAL87] B. Heinrich, A.S. Arrott, C. Liu, S.T. Purcell: J. Vac. Sci. Technol. A 5 (1987) 1935
- [HAW98] T. Hecht, C. Auth, H. Winter: Nucl. Instr. Meth. B 135 (1998) 377
- [HB94] B. Heinrich, J.A.C. Bland (Eds.): Ultrathin Magnetic Structures II, Springer, Berlin Heidelberg, 1994
- [HB98] S. Handschuh, S. Blügel: Solid State Comm. 105 (1998) 633
- [HBW98] S. Heinze, S. Blügel, R. Wiesendanger: Phys. Rev. B 58 (1998) 16432
- [HCM99] B. Heinrich, J.F. Cochran, T. Monchesky, R. Urban: Phys. Rev. B 59 (1999) 14520
- [HCM00] B. Heinrich, J.F. Cochran, T. Monchesky, R. Urban: J. Appl. Phys. 87 (2000) 5449
- [HEC96] T. Hecht: Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin 1996
- [HEC99] T. Hecht: persönliche Mitteilung, Berlin 1999
- [HGB93] G. Helgesen, D. Gibbs, A.P. Baddorf, D.M. Zehner, S.G.J. Mochrie: Phys. Rev. B 48 (1993) 15320
- [HJK75] J.M. Hansteen, O.M. Johnsen, L. Kobach: Atomic Data Tables 15 (1975) 305
- [HOE99] M. Horn-von Hoegen: Z. Kristallogr. 214 (1999) 1
- [IGE96] T. Igel: Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin 1996
- [IPW96] T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Europhys. Lett. 35 (1996) 67
- [IPW98] T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Surf. Sci. 405 (1998) 182
- [ITL93] Y.U. Idzerda, L.H. Tjeng, H.-J. Lin, G. Meigs, C.T. Chen, J. Gutierrez: J. Appl. Phys. 73 (1993) 6204
- [JAC74] D.P. Jackson: Surf. Sci. 43 (1974) 431
- [JIH98] J.F. Jia, K. Inoue, Y. Hasegawa, W.S. Yang, T. Sakurai: Phys. Rev. B 58 (1998) 1193
- [JKP89] B.T. Jonker, J.J. Krebs, G.A. Prinz: Phys. Rev. B 39 (1989) 1399
- [JW95] Q. Jiang, G.C. Wang: Surf. Sci. 324 (1995) 357
- [KGD84] J. Kirschner, M. Glöbl, V. Dose, H. Scheidt: Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 612
- [KGS77] E. Kupfer, H. Gabriel, H. Schröder: Z. Physik A 283 (1977) 321
- [KH91] A.W. Kleyn, T.C.M. Horn: Phys. Rep. 199 (1991) 191
- [KIR88] J. Kirschner: J. Appl. Phys. 64 (1988) 5915
- [KM87] K. Kimura, M. Mannami: Nucl. Instr. Meth. B 27 (1987) 442
- [KTM96] S.K. Kim, Y. Tian, M. Montesano, F. Jona, P.M. Marcus: Phys. Rev. B 54 (1996) 5081
- [LB86] Landolt-Börnstein, Gruppe III, Band 19, Springer, Berlin, 1986
- [LD89] P.K. Larsen, P.J. Dobsen: Reflection High-Energy Electron Diffraction and Reflection Electron Imaging of Surfaces, NATO ASI Series 188, Plenum Press, New York, 1989. (und dort aufgeführte Referenzen)
- [LEU94] J. Leuker: Dissertationsschrift, Westfälische Wilhelms-Universität Münster 1994
- [LIN65] J. Lindhard: Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 34 (1965)
- [LL63] C. Lehmann, G. Leibfried: Z. Phys. 172 (1963) 465
- [LOZ97] J. Leuker, H.W. Ortjohann, R. Zimny, H. Winter: Surf. Sci. 388 (1997) 262
- [LW93] J. Leuker, H. Winter: Nucl. Instr. Meth. B 78 (1993) 163
- [MAR89] C. Marsch: Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 1989

-
- [MAT88] J. Mathon: Rep. Prog. Phys. 51 (1988) 1
- [MC99] S.V. Man'kovsky, V.T. Cherepin: Vacuum 54 (1999) 137
- [MEJ95] S. Mirbt, O. Eriksson, B. Johansson, H.L. Skriver: Phys. Rev. B 52 (1995) 15070
- [MOL47] G. Molière: Z. Naturforsch. A 2 (1947) 133
- [MPS82] F. Meier, D. Pescia, T. Schriber: Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 645
- [MW91] C. Marsch, H. Winter: Z. Phys. D 18 (1991) 25
- [NDM98] A. Närmann, M. Dirska, J. Manske, G. Lubinski, M. Schleberger, R. Hoekstra: Surf. Sci. 398 (1998) 84
- [NME90] A. Närmann, R. Monreal, P.M. Echenique, F. Flores, W. Heiland, S. Schubert: Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 1601
- [NOR88] C. Norris et al.: Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2241
- [NSW95] M. Nohlen, M. Schmidt, K. Wandelt: Surf. Sci. 331-333 (1995) 902
- [NTT80] K. Nishimori, H. Tokutaka, K. Takashima: Surf. Sci. 100 (1980) 665
- [NWZ97] B. Nonas, K. Wildberger, R. Zeller, P.H. Dederichs: JMMM 165 (1997) 137
- [NWZ98] B. Nonas, K. Wildberger, R. Zeller, P.H. Dederichs: Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 4574
- [OB86] D.J. O'Connor, J.P. Biersack: Nucl. Instr. Meth. B 15 (1986) 14
- [OFC95] A.A. Ostroukhov, V.M. Floka, V.T. Cherepin: Surf. Sci. 331-333 (1995) 1388
- [OFW83] S. Ohnishi, A.J. Freeman, M. Weinert: Phys. Rev. B 28 (1983) 6741
- [OR76] O. Oen, M.T. Robinson: Nucl. Instr. Meth. B 2 (1976) 647
- [OSW99] M. Ostwald: Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin 1999
- [PC89] B. Poelsema, G. Comsa: Scattering of Thermal Energy Atoms from Disordered Surfaces, Springer, Berlin, 1989
- [PCU93] D.T. Pierce, R.J. Celotta, J. Unguris: J. Appl. Phys. 73 (1993) 6201
- [PFA98] R. Pfandzelter: Phys. Rev. B 57 (1998) 15496
- [PFA99] R. Pfandzelter: Nucl. Instr. Meth. B 157 (1999) 291
- [PGJ79] J.C. Peruchetti, G. Gewinner, A. Jaegle: Surf. Sci. 88 (1979) 479
- [PIO99] R. Pfandzelter, T. Igel, M. Ostwald, H. Winter: Appl. Surf. Sci. 142 (1999) 470
- [PIW00] R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Phys. Rev. B 62 (2000) R2299
- [PIW96] R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Phys. Rev. B 54 (1996) 4496
- [PIW97a] R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Phys. Rev. B 56 (1997) 14948
- [PIW97b] R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Surf. Sci. 375 (1997) 13
- [PIW97c] R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Surf. Sci. 377-379 (1997) 963
- [PIW97d] R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Surf. Sci. 389 (1997) 317
- [PJM92] S.T. Purcell, M.T. Johnson, N.W.E. McGee, R. Coehoorn, W. Hoving: Phys. Rev. B 45 (1992) 13064
- [PKI98] R. Pfandzelter, T. Kowalski, T. Igel, H. Winter: Surf. Sci. 411 (1998) L894
- [PL93] R. Pfandzelter, J. Landskron: Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 1279
- [PMR90] S.S. Parkin, N. More, K.P. Roche: Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 2304
- [POW01] R. Pfandzelter, M. Oswald, H. Winter: Phys. Rev. B 63 (2001) 140406(R)
- [PSS93] R. Pfandzelter, F. Stölzle, H. Sakai, Y.H. Ohtsuki: Nucl. Instr. Meth. B 83 (1993) 469
- [PSU94] D.T. Pierce, J.A. Stroschio, J. Unguris, R.J. Celotta: Phys. Rev. B 49 (1994) 14564

-
- [RAU82] C. Rau: JMMM 30 (1982) 141
- [RE86] C. Rau, S. Eichner: Phys. Rev. B 34 (1986) 594
- [RGS97] O. Rader, W. Gudat, D. Schmitz, C. Carbone, W. Eberhard: Phys. Rev. B 56 (1997) 5053
- [RKH95] C. Roth, T. Kleeman, F.U. Hillebrecht, E. Kisker: Phys. Rev. B 52 (1995) R15691
- [RLS86] C. Rau, C. Liu, A. Schmalzbauer, G. Xing: Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2311
- [SCH73] P. Schofield: Comput. Commun. 5 (1973) 17
- [SFV96] T. Schlathölter, H. Franke, M. Vicanek, W. Heiland: Surf. Sci. 363 (1996) 79
- [SLF92] Z.-P. Shi, P.M. Levy, J.L. Fry: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 3678
- [SP94] J.A. Strosio, D.T. Pierce: Phys. Rev. B 49 (1994) 8522
- [SPD93] J.A. Strosio, D.T. Pierce, R.A. Dragoset: Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 3615
- [SUK90] M.R. Scheinfein, J. Unguris, M.H. Kelley, D.T. Pierce, R.J. Celotta: Rev. Sci. Instrum. 61 (1990) 2501
- [SV83] M. Schuster, C. Varelas: Surf. Sci. 134 (1983) 195
- [SVD95] D. Stoeffler, A. Vega, H. Dreyssé, C. Demangeat: Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 384 (1995) 247
- [TB94] C. Turtur, G. Bayreuther: Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 1557
- [TCE82] A.M. Turner, Yu J. Chang, J.L. Erskine: Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 348
- [TFW00] I. Turek, M. Freyss, P. Weinberger, D. Stoeffler, H. Dreyssé: Phys. Rev. B 63 (2000) 024413
- [THO83] E.W. Thomas: Appl. At. Coll. Phys. 4 (1983) 299
- [TPP91] S. Tamura, C.J. Powell, D.R. Penn: Surf. Interf. Anal. 17 (1991) 911
- [TSA93] J.Y. TSAO: Materials Fundamentals of Molecular Beam Epitaxy, Academic Press, San Diego, 1993, S.151
- [TUC00] D.A. Tulchinsky, J. Unguris, R.J. Celotta: JMMM 212 (2000) 91
- [TWF98] I. Turek, P. Weinberger, M. Freyss, D. Stoeffler, H. Dreyssé: Phil. Mag. B 78 (1998) 637
- [UCP91] J. Unguris, R.J. Celotta, D.T. Pierce: Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 140
- [UCP92] J. Unguris, R.J. Celotta, D.T. Pierce: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 1125
- [VBD96] A. Vega, S. Bouarab, H. Dreyssé, C. Demangeat: Thin Solid Films 275 (1996) 103
- [VF85] R.H. Victora, L.M. Falicov: Phys. Rev. B 31 (1985) 7335
- [VH96] D. Venus, B. Heinrich: Phys. Rev. B 53 (1996) R1733
- [VPT92] J. Villain, A. Pimpinelli, L. Tang, D. Wolf: J. Phys. I France 2 (1992) 2107
- [VS75] C. Varelas, R. Sizmann: Radiat. Eff. 25 (1975) 163
- [VSH84] J.A. Venables, G.D.T. Spiller, M. Hanbücken: Rep. Prog. Phys. 47 (1984) 399
- [VWH89] E. Veje, H. Winter, H. Hagedorn: Radiat. Effects in Defects and Solids 109 (1989) 47
- [WEC98] J. Wecker, Siemens AG, Erlangen, Vortrag AM7.1 im Fachgremium Magnetismus, 62. Physikertagung Regensburg 1998
- [WF92] R. Wu, A.J. Freeman: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2867
- [WF95] R. Wu, A.J. Freeman: Phys. Rev. B 51 (1995) 17131
- [WH93] T.G. Walker, H. Hopster: Phys. Rev. B 48 (1993) 3563
- [WH94] T.G. Walker, H. Hopster: Phys. Rev. B 49 (1994) 7687

-
- [WIN83] H. Winter: Physica Scripta I 6 (1983) 136
[WIN90] H. Winter: Z. Phys. D 17 (1990) 109
[WIN91] H. Winter: Comments At. Mol. Phys. 26 (1991) 305
[WIN92] H. Winter: Z. Phys. D 23 (1992) 41
[WIN92a] H. Winter: Phys. Rev. A 46 (1992) R13
[WIN96] H. Winter: J. Phys.: Condens. Matter 8 (1996) 10149
[WL97] H. Winter, J. Leuker: Phys. Lett. A 234 (1997) 453
[WM83] R.J. Wilson, A.J. Mills: Surf. Sci. 128 (1983) 70
[WND98] L.T. Wille, B. Nonas, P.H. Dederichs, H. Dreyse: Phil. Mag. B 78 (1998) 643
[WPH92] T.G. Walker, A.W. Pang, H. Hopster, S.F. Alvarado: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 1121
[WS69] F. Wooten, R.N. Stuart: Phys. Rev. 186 (1969) 592
[WZ88] H. Winter, R. Zimny in "Coherence in Atomic Collision Physics", Ed.: H.J. Beyer, K. Blum, K. Hippler, Plenum Publishing Corporation 1988
[WZW95] M. Wilke, R. Zimny, H. Winter: Nucl. Instr. Meth. B 100 (1995) 396
[ZB94] R. Zimny, A.G. Borisov: Z. Phys. D 30 (1994) 255
[ZBL85] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark: The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon, New York 1985
[ZNW90] R. Zimny, H. Nienhaus, H. Winter: Vacuum 41 (1990) 359
[ZHW88] R. Zimny, H. Hagedorn, H. Winter, J. Kirschner: J. Appl. Phys. A 47 (1988) 77
[ZW91] J.K. Zuo, J.F. Wendelken: Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 2227

VERÖFFENTLICHUNGEN

C. Auth, T. Hecht, T. Igel, H. Winter: Image Charge Acceleration of Multicharged Ions in Front of the Surface of an Insulator, Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 5244

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Intensity Oscillations in Grazing Scattering of fast He^+ -Ions during Heteroepitaxial Growth of Cr on Fe(100), Europhys. Lett. 35 (1996) 67

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Intermixing during Growth of Cr on Fe(100) Studied by Proton- and Electron-induced Auger Electron Spectroscopy, Phys. Rev. B 54 (1996) 4496

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Initial Growth of Ultrathin Cr Films on Fe(100), Surf. Sci. 375 (1997) 13

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Interfacial Mixing of Ultrathin Cr Films on Fe(100) Studied by Auger Electron Spectroscopy, Surf. Sci. 377-379 (1997) 963

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Anomalous Thermal Behavior of the Fe(100) Surface Observed by Grazing Ion-surface Scattering, Phys. Rev. B 56 (1997) 14948

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Growth and Structure of Ultrathin Mn Films on Fe(001), Surf. Sci. 389 (1997) 317

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Proton-Induced Auger Electrons from Ultrathin Mn Films on Fe(100), Surf. Sci. 405 (1998) 182

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Magnetic Ordering of Ultrathin Mn Films on Fe(100) Studied via Capture of Polarized Electrons by Fast Ions, Phys. Rev. B 58 (1998) 2430

R. Pfandzelter, T. Kowalski, T. Igel, H. Winter: Rainbow Scattering at Surface Steps, Surf. Sci. 411 (1998) L894

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Spin Polarized Electron Capture During Ion Impact on a Ferromagnetic Surface, Phys. Rev. B 59 (1999) 1

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Capture of Polarized Electrons during Scattering of He^+ -ions from Clean and Mn-covered Fe(100)-Surfaces, J. Magn. Magn. Mater. 192 (1999) 43

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Surface Magnetism of Ultrathin Mn- and Cr-Films on Fe(100) Studied via Capture of Polarized Electrons by He^+ -ions, Appl. Surf. Sci. 142 (1999) 532

R. Pfandzelter, T. Igel, M. Ostwald, H. Winter: Fe(100) Homoepitaxy Studied by Grazing Scattering of Fast Ions, Appl. Surf. Sci. 142 (1999) 470

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Surface Magnetism of Ultrathin Cr, Mn and Fe Films on Fe(100) Studied via Electron Capture Spectroscopy, Nucl. Instrum. Methods B 157 (1999) 286

R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Real-time Study of Nucleation, Growth and Ripening During Fe/Fe(100) Homoepitaxy via Ion Scattering, Phys. Rev. B 62 (2000) R2299

T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Ultrathin V Films on Fe(100): Growth and Interfacial Alloying, Sol. State Comm. 116 (2000) 477

D.M. Danailov, R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter: Multimodal Angular Distributions in Grazing Scattering of Fast He-atoms from Fe(100) Surfaces, Nucl. Instr. Meth. B 164-165 (2000) 583

D.M. Danailov, R. Pfandzelter, T. Igel, H. Winter, K. Gärtner: Test of the Interatomic Potential in the eV-region by Glancing Angle Scattering of He-atoms from Fe(100), Appl. Surf. Sci. 171 (2001) 113

Konferenzbeiträge:

Poster: T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Streifende Streuung von schnellen Ionen an epitaktischen Metallfilmen, Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik bei der DPG, Regensburg 1996

Vortrag: T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Einfang polarisierter Elektronen in angeregte Terme bei der streifenden Streuung schneller Ionen an Fe(100) und Cr/Fe(100), Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik bei der DPG, Münster 1997

Poster: T. Igel, R. Pfandzelter, H. Winter: Nukleation und anfängliches Wachstum von Cr/Fe(100), Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik bei der DPG, Münster 1997

Danksagung

Ich möchte an dieser Stelle die Gelegenheit nutzen, mich bei all denjenigen zu bedanken, die mit ihrer Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Zunächst bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. H. Winter für die Aufgabenstellung und die Bereitstellung des Labors zur Durchführung der Experimente. Von ihm habe ich eine Reihe experimenteller Fertigkeiten erlernt und so manche Tricks für "schnelle Tests" abgucken können. Oft genügte schon ein hilfreiches "Handauflegen", um den Beschleuniger wieder zum Laufen zu bringen...

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. habil. R. Pfandzelter als meinen direkten Betreuer, Diskussionspartner und manchmal auch Leidensgenosse. Ohne ihn wäre für mich die Welt der streifenden Ionenstreuung und des Oberflächenmagnetismus heute noch immer ein Buch mit sieben Siegeln. Ich danke ihm für die vielen interessanten und anregenden Gespräche, die Bereitstellung unzähliger Simulationsrechnungen zur Auswertung der experimentellen Daten, die hilfreiche Durchsicht der Korrekturfahne und die Kunst, mich in aussichtslosen Situationen immer wieder zu motivieren.

Für zahlreiche Denkanstöße bin ich Herrn Dr. C. Auth, Dr. A. Mertens, Dr. A. G. Borisov, Dr. R.-P. Blum und weiteren Kollegen und Gästen am Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin verbunden. Herrn Dr. T. Hecht danke ich darüber hinaus für die guten Anregungen beim Korrekturlesen des Manuskripts.

Ohne die schnelle und fachlich unübertreffliche Hilfe von Herrn Dipl.-Ing. K. Maass bei der Lösung elektrischer und elektronischer Probleme am Beschleuniger und der Meßgeräte wäre so mancher Labortag schlichtweg ausgefallen. Seine Unterstützung bei der Erstellung und Verfeinerung der Steuer-Programme für die Messungen war mir ebenfalls eine große Hilfe.

Für die technische Unterstützung bei Konstruktion, Umbauten, Reparaturen etc. bedanke ich mich bei Herrn Dipl.-Phys. R. A. Noack, A. Laws, Frau P. Wolf, Herrn J. Sölle und den Mitarbeitern der Mechanischen Werkstatt des Fachbereichs Physik.

Den Mitarbeitern des Lehrstuhls für Atomstoßprozesse unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. H. Niehus danke ich für ihre Zeit, die sie meinen gelegentlichen Nachfragen gewidmet haben und für die technischen Leihgaben wie Punktschweißgerät, Infrarot-Thermometer und manch anderes Kleinteil.

Herrn Dipl.-Phys. M. Ostwald und T. Bernhard gilt mein Dank für die Vorbereitung und Durchführung mehrerer Experimente. Dies gab mir desöfteren die Gelegenheit, ein paar Stunden Büroarbeit einzuschieben...

Bei Frau M. Janetzky möchte ich mich für die Hilfe in Sachen Organisation bürokratischer Notwendigkeiten und das "Grün auf dem Fensterbrett" bedanken, das mir den Alltag oft erleichterte. Für gelegentliche Zuarbeiten, selbst unter Überwindung ihrer Computer-Scheu, bedanke ich mich herzlich bei Frau A. Bensch.

Für die Bereitstellung der finanziellen Mittel als Grundlage der Anfertigung dieser Arbeit im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 290 "Metallische dünne Filme: Struktur, Magnetismus und elektronische Eigenschaften" bin ich der DFG dankbar. Die Kolloquien und Diskussionen mit den Mitarbeitern anderer Teilprojekte des SFB boten beste Möglichkeiten zur Weiterbildung und des interdisziplinären Gedankenaustauschs.

Um die Freundschaft mit Udo darf mich jeder beneiden. Er hielt in Streß-Situationen oft eine Tasse Kaffee für mich bereit und nahm sich die Zeit für ein entspannendes Gespräch.

Mein besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mir das Studium der Physik ermöglicht und mich stets mit ihrer Anteilnahme begleitet haben. Ihr habt mir durch Euer Vertrauen in mich immer wieder den Rücken gestärkt und dadurch maßgeblich zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen.

Allen Freunden und Studienkollegen und ganz besonders meiner Lebensgefährtin Kira Holtzendorff bin ich für das persönliche Umfeld und ihre moralische Unterstützung dankbar, ohne welche mir die Anfertigung dieser Arbeit und die Bewältigung zahlloser Probleme kaum möglich gewesen wäre.

SELBSTÄNDIGKEITSERKLÄRUNG

Hiermit erkläre ich diese Arbeit selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt zu haben.

Ich habe mich anderwärts nicht um einen Doktorgrad beworben und besitze einen entsprechenden Doktorgrad nicht.

Ich erkläre die Kenntnisnahme der dem Verfahren zugrunde liegenden Promotionsordnung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I der Humboldt-Universität zu Berlin.

Berlin, den 30. 06. 2001

Thomas Igel

LEBENS LAUF

Name	Thomas Igel
Anschrift	Bastianstraße 24, 13357 Berlin
Geburtsdatum	27.01.1969
Geburtsort	Dahme
Familienstand	ledig
1975 - 1985	Besuch der Polytechnischen Oberschule "Ernst Thälmann" in Ludwigsfelde
1985 - 1987	Besuch der Erweiterten Oberschule "Arthur Ladwig" in Ludwigsfelde
03.07.1987	Abitur
03.09.1990	Immatrikulation an der Humboldt-Universität zu Berlin im Fachbereich Physik / Fachrichtung Physik
08.10.1992	Vordiplom im Studiengang Physik
29.04.1996	Diplom im Studiengang Physik
05/1995 - 03/2000	wissenschaftlicher Mitarbeiter des Lehrstuhls "Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten" am Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin mit dem Ziel der Promotion
04/2000 - 9/2000	Prozessingenieur im Department Films - CVD/PVD bei der Semiconductor300 GmbH & Co. KG, Dresden
seit 10/2000	Prozessingenieur im Department CVD/PVD bei Infineon Technologies SC300 GmbH & Co. KG, Dresden